



UAEM

Universidad Autónoma
del Estado de México



Universidad Autónoma del Estado de México • Secretaría de Docencia • Dirección de Estudios Profesionales

Universidad Autónoma del Estado de México

Licenciatura de Químico 2003

Programa de Estudios:

Diseño y Reactividad Molecular

**UAEM**Universidad Autónoma
del Estado de México

Universidad Autónoma del Estado de México • Secretaría de Docencia • Dirección de Estudios Profesionales

I. Datos de identificación

Licenciatura

Químico 2003

Unidad de aprendizaje

Diseño y Reactividad Molecular

Clave

Carga académica

3

0

3

6

Horas teóricas

Horas prácticas

Total de horas

Créditos

Período escolar en que se ubica

1

2

3

4

5

6

7

8

9

Seriación

Teoría Cuántica

Aplicaciones del Modelado
Molecular

UA Antecedente

UA Consecuente

Tipo de Unidad de Aprendizaje

Curso

☒

Curso taller

Seminario

☐

Taller

Laboratorio

☐

Práctica profesional

Otro tipo (especificar)

Modalidad educativa

Escolarizada. Sistema rígido

☐

No escolarizada. Sistema virtual

Escolarizada. Sistema flexible

☒

No escolarizada. Sistema a distancia

No escolarizada. Sistema abierto

☐

Mixta (especificar)

Formación común

Ingeniería Química 2003

☐

Químico Farmacéutico Biólogo 2006

Química en Alimentos 2003

☐**Formación equivalente****Unidad de Aprendizaje**

Ingeniería Química 2003

Químico Farmacéutico Biólogo
2006

Química en Alimentos 2003

**UAEM**Universidad Autónoma
del Estado de México

Universidad Autónoma del Estado de México • Secretaría de Docencia • Dirección de Estudios Profesionales

II. Presentación

La Unidad de Aprendizaje (UA) de Diseño y reactividad molecular que aquí se presenta se ubica en el área de acentuación de Química Computacional y pretende aportar al alumno conocimientos de la química como una ciencia activa y en continuo crecimiento; su importancia es fundamental para el entendimiento de la química, pues permite que el alumno conozca la estructura atómica y el enlace químico de manera profunda; y las aplicaciones prácticas que ellos presentan, completando la formación del egresado como un profesional que aportará beneficios para el logro de mejores condiciones de vida en nuestro mundo tanto en el ámbito de la práctica profesional, como en los del conocimiento y preservación de la naturaleza, contribuyendo por lo tanto al mejoramiento del entorno social en el que se desarrolla.

Las competencias que la UA promueve en el estudiante tienen un carácter integral, el nivel cognoscitivo pretende alcanzar los niveles de comprensión de conceptos y su aplicación en la solución de problemas relacionados con la química cuántica como un área de gran desarrollo y creciente interés, promueve la comunicación efectiva al participar en trabajos en equipo, comprometiéndose en un desempeño de calidad en el trabajo, que le permitan de manera eficaz iniciar los estudios de su profesión ante los retos actuales y futuros del entorno.

La UA consta de cuatro unidades de competencia: Método aproximados, Átomos, Moléculas y Espectroscopía molecular. Por lo que estrategias como la investigación documental, la discusión de temas, exposiciones del profesor y de los estudiantes conformaran las actividades centrales durante esta UA.

Los criterios de evaluación tienen un carácter de proceso continuo en el cual la realimentación oportuna a los estudiantes acerca de su desempeño será factor clave en el aprendizaje, de manera que el estudiante realizará trabajos previos y posteriores a las sesiones de clase como: investigación documental de temas y resolución de problemas; trabajo activo en clase (discusión de temas, resolución de problemas tipo y exposiciones ante el grupo); y presentación de las evaluaciones tanto las que señale el calendario oficial respectivo, como la de diagnóstico y algunas de carácter formativo.

III. Ubicación de la unidad de aprendizaje en el mapa curricular

Núcleo de formación:	Integral
Área Curricular:	Ciencias del Perfil Profesional
Carácter de la UA:	Optativa

IV. Objetivos de la formación profesional.



UAEM

Universidad Autónoma
del Estado de México



Universidad Autónoma del Estado de México • Secretaría de Docencia • Dirección de Estudios Profesionales

Objetivos del programa educativo:

Formar y capacitar a los estudiantes con bases humanísticas, científicas y tecnológicas mediante el conocimiento de los principios y fundamentos de las Matemáticas y Ciencias Naturales para lograr competencias sustantivas propias de las Ciencias de la Disciplina, y de la Química aplicada en tres posibles orientaciones, así como desarrollar habilidades superiores del pensamiento reforzando actitudes y valores para que aplicando las metodologías apropiadas sean capaces de resolver problemas inherentes a su profesión, con ética y excelencia, promoviendo su superación y la mejora de su entorno, y como consecuencia incrementar la calidad de vida del país.

Objetivos del núcleo de formación:

Proporciona una visión integradora-aplicativa de carácter interdisciplinario y transdisciplinario, que complementa y orienta la formación al permitir opciones para su ejercicio profesional.

Objetivos del área curricular o disciplinaria:

V. Objetivos de la unidad de aprendizaje.

Proporcionar a los estudiantes conocimientos profundos de estructura atómica y enlace químico para entender la estructura y la reactividad de las moléculas y los materiales, así como fortalecer y desarrollar habilidades, actitudes y valores que les permitan trabajar de manera individual o en equipo para la resolución de problemas relacionados a la UA. Con una visión de respeto orientada a la calidad en el trabajo, la perseverancia y tolerancia, así como la disposición a aprender a aprender.

VI. Contenidos de la unidad de aprendizaje y su organización

Unidad 1.

Objetivo: Conocer los métodos aproximados que utiliza la química cuántica, para que el alumno reconozca las simplificaciones necesarias para calcular las propiedades de sistemas atómicos y moleculares. Mostrando calidad en el trabajo tanto individual como en equipo. Con una visión de respeto, perseverancia y tolerancia, así como la disposición de aprender a aprender.



1.1 Método perturbativo

1.2 Método variacional

Unidad 2.

Objetivo: Aplicar los métodos aproximados en el cálculo de las propiedades atómicas para que el alumno conozca la estructura atómica y las condiciones necesarias para describir un sistema polieletrónico. Mostrando calidad en el trabajo tanto individual como en equipo. Con una visión de respeto, perseverancia y tolerancia, así como la disposición de aprender a aprender.

2.1 Unidades atómicas

2.2 Aplicación de los métodos aproximados al átomo de Helio

2.3 Método Hartree Fock

2.4 Espín electrónico

2.5 Funciones de onda antisimétricas y determinantes de Slater

2.6 Configuración electrónica

Unidad 3.

Objetivo: Aplicar los métodos aproximados en el cálculo de las propiedades moleculares para que el alumno conozca los fundamentos del enlace químico, la estructura y la reactividad molecular. Mostrando calidad en el trabajo tanto individual como en equipo. Con una visión de respeto, perseverancia y tolerancia, así como la disposición de aprender a aprender.

3.1 Aproximación de Born-Oppenheimer

3.2 Tratamiento unión-valencia

3.3 Tratamiento de orbitales moleculares

3.4 Configuración electrónica molecular y espectros fotoelectrónicos

3.5 Combinación lineal de orbitales atómicos

3.6 Estados electrónicos de moléculas diatómicas

3.7 Hibridación

3.8 Aproximación de Hückel

Unidad 4.

Objetivo: Conocer las bases físicas de la espectroscopía molecular para que el alumno cuente con fundamentos sólidos de las técnicas espectroscópicas



UAEM

Universidad Autónoma
del Estado de México



Universidad Autónoma del Estado de México • Secretaría de Docencia • Dirección de Estudios Profesionales

utilizadas en químicas. Mostrando calidad en el trabajo tanto individual como en equipo. Con una visión de respeto, perseverancia y tolerancia, así como la disposición de aprender a aprender.

4.1 Modelos para la rotación y vibración molecular

4.2 Transiciones e intensidades

4.3 Reglas de selección

4.4 Principio de Franck-Condon

4.5 Modos normales de vibración

VII. Sistema de Evaluación

- ✓ En el desarrollo de la UA se evaluará la identificación y la aplicación de los conocimientos, las habilidades adquiridas, las actitudes y valores desarrollados, mediante:
 - Actividades individuales como: Elaboración de mapas conceptuales o gráficos de recuperación y resolución de series de problemas (exámenes previos y departamentales)
 - Actividades en equipo como: Elaboración de mapas conceptuales o gráficos de recuperación, investigación documental escrita y exposición de investigación documental escrita.
- ✓ La UA se acreditará a través de dos evaluaciones parciales y una final sumaria (equivalente al examen ordinario), con un promedio mínimo de calificación de 6.0 puntos en una escala de 10.0 para ser promovido. No hay pase automático, es obligatoria la presentación del examen departamental final.
- ✓ Los porcentajes de las calificaciones e integración de cada evaluación son los siguientes:

○ Primera evaluación	30%
○ Segunda evaluación	30%
○ Evaluación final	40%
- ✓ Las evaluaciones primera, segunda y final se conformaran por las siguientes actividades:

○ Actividades en o fuera del aula	30%
▪ Individuales	40%
• Elaboración individual de mapa conceptual o gráfico de recuperación	30%
• Examen previo	70%



UAEM

Universidad Autónoma
del Estado de México



Universidad Autónoma del Estado de México • Secretaría de Docencia • Dirección de Estudios Profesionales

- En equipo 60%
 - Elaboración individual de mapa conceptual o gráfico de recuperación 30%
 - Investigación documental escrita 40%
 - Exposición de investigación documental escrita 40%
- Examen departamental 70%

VIII. Acervo bibliográfico

McQuarrie, D. A. "Quantum Chemistry", University Science Book, 2008

Levine, Ira N. "Química Cuántica", Pearson Prentice Hall, 2001.

Hanna, H. "Mecánica Cuántica para Químicos", Fondo Educativo Interamericano, 1969

Pilar, F. L. "Elementary quantum chemistry" McGraw-Hill 1990

Veszprémi, T; Fehér, M. "Quantum chemistry: fundamentals to applications" Kluwer Academic/Plenum Publishing