

Registro RENIECYT-CONAHCYT: 2000001

Curso: Química Cuántica I



Profesor: Dra Brenda Manzanilla

https://mx.linkedin.com/in/brenda-manzanilla-a3155a6a/en?trk=public_profile_locale-url

Curso asincrónico

<https://www.classroom.google.com/>

Inicia: 6 de mayo del 2024

Duración: 16 horas

Acerca del curso

Adquirir los conocimientos formativos de la Química Cuántica para comprender el comportamiento de los átomos y moléculas matemáticamente, lo cual permite

comprender qué hacen las computadoras para estudiar las moléculas con las distintas herramientas computacionales.

TEMARIO

-Presentación y examen diagnóstico

1.-Introducción a la mecánica cuántica

- o Radiación del cuerpo negro
- o Efecto fotoeléctrico
- o La hipótesis de Broglie
- o El principio de incertidumbre

2.-Postulados de la mecánica cuántica

3.-Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

- o Significado de la función de onda

4.-Operadores

5.-La Partícula en una caja

6.-Modelo del oscilador armónico

- o Efecto túnel

7.-Modelo de momento angular

8.-El átomo hidrogenoide

o Rotor Rígido

o Tabla periódica: energía de ionización y afinidad electrónica

9.-Átomos multielectrónicos

o Métodos aproximados

Práctica Computacional: *Optimización de geometría, cálculo de frecuencias y obtención de espectros IR.* El estudiante aprenderá los comandos básicos para obtener geometrías y frecuencias vibracionales de la molécula de estudio para obtener espectros IR. Se usarán visualizadores gratuitos como Avogadro para visualizar los resultados. Con esto se pretende relacionar el modelo del oscilador armónico y métodos aproximados con datos experimentales.

-Examen y/o actividad final

Nota: durante el desarrollo del curso se calificará en 70% y un examen final y/o actividad con calificación del 30%.

Inversión: \$ 880 MXM (50.2 USD). Para inscribirse hacer pago a la cuenta CLABE SANTANDER: 0141-8065-5079-1315-04, a nombre de Pharmaceutical and Biotechnological Innovation Services SAS De CV. El comprobante se manda al correo: pharmaceuticalandbiotechnology@gmail.com También puede pagar por **PayPal**, MERCADO PAGO (TDD, TDC, OXXO, etc) o stripe en: <https://bit.ly/3PqOmyb>. Descuentos 10 % estudiantes de licenciatura y haber tomado más de dos cursos y/o diplomados en pharbiois. 5 % de descuento a estudiantes de Posgrado, profesores de tiempo parcial y posdocs, haber tomado un curso y/o diplomado previo en pharbios.com.

Comentarios al curso

- Ha sido muy importante el nivel de profundización.
- Los contenidos programados para cualquier persona que quiera ingresar por primera vez entender estos desarrollos tan complejos o también.

Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV



- Quiero manifestar mis más sinceros agradecimientos por permitirme de forma asincrónica y considerando los ritmos de aprendizaje poder terminar exitosamente el curso pueden ser muy relevantes para todo aquel que requiera un nivel de actualización en este campo del saber.
- Espero hacer parte de los otros cursos y diplomados que me permitan estar a la vanguardia en este campo.