

UNIDAD: IZTAPALAPA		DIVISIÓN CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERÍA	
NIVEL: LICENCIATURA		EN QUÍMICA	
CLAVE: 2141121	UNIDAD DE ENSEÑANZA - APRENDIZAJE: QUÍMICA CUÁNTICA APLICADA		TRIM: VIII-XII
HORAS TEORÍA: 3	SERIACIÓN 2141086		CRÉDITOS: 9
HORAS PRÁCTICA: 3			OPT/OBL: OPT.

OBJETIVO(S):

GENERAL

- Que al final del curso el alumno sea capaz de comprender los fundamentos de los cálculos de estructura electrónica de átomos, moléculas y sólidos, y aplicarlos al estudio de sistemas de interés químico.

ESPECÍFICOS

Que al final del curso el alumno sea capaz de:

- Aplicar el método variacional al caso de combinación lineal de funciones.
- Comprender el concepto de conjunto de funciones atómicas de base.
- Describir la teoría de orbitales moleculares utilizando la combinación lineal de funciones atómicas de base.
- Conocer las características básicas de los métodos más utilizados en cálculos de estructura electrónica.
- Describir los aspectos básicos de las funciones de base que se utilizan en los cálculos de estructura electrónica de átomos polieletrónicos.
- Realizar cálculos de estructura electrónica de moléculas para determinar propiedades termodinámicas y cinéticas.
- Describir las características de la distribución electrónica de moléculas por medio de análisis de población.
- Conocer las características básicas de los métodos utilizados para incorporar los efectos del solvente.
- Realizar cálculos de propiedades espectrales de resonancia magnética nuclear.
- Describir las características principales de la estructura electrónica de bandas en sólidos.
- Describir los efectos relativistas en la estructura electrónica de átomos, moléculas y sólidos.

CONTENIDO SINTÉTICO:

1. El método variacional
 - 1.1 Principio variacional
 - 1.2 Combinación lineal de funciones
 - 1.3 El método de Huckel

NOMBRE DEL PLAN LICENCIATURA EN QUÍMICA		2/3
CLAVE 2141121	UNIDAD DE DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE QUÍMICA CUÁNTICA APLICADA	

2. Teoría de orbitales
 - 2.1 Funciones de base
 - 2.2 Ecuaciones de Hartree-Fock-Roothaan
3. Métodos para el cálculo de estructura electrónica
 - 3.1 Métodos basados en la función de onda
 - 3.2 Métodos basados en la densidad electrónica
4. Átomos polielectrónicos
 - 4.1 Análisis de las funciones de base
 - 4.2 Potenciales de ionización
 - 4.3 Afinidades electrónicas
5. Moléculas
 - 5.1 Optimización de geometría
 - 5.2 Propiedades termodinámicas
 - 5.3 Propiedades cinéticas
 - 5.4 Análisis de población
 - 5.5 Efectos del solvente
 - 5.6 Propiedades espectrales de resonancia magnética nuclear
6. Sólidos
 - 6.1 Teorema de Bloch
 - 6.2 Funciones de base
 - 6.3 Estructura de bandas
 - 6.4 El gap electrónico
7. Efectos relativistas
 - 7.1 Corrección de masa-velocidad
 - 7.2 Acoplamiento espín-órbita
 - 7.3 Acoplamiento espín-espín
 - 7.4 Corrección de Darwin

MODALIDADES DE CONDUCCIÓN DEL PROCESO DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE:

- Clase de teoría en forma de Conferencia magistral.
- Clase en forma de taller en un laboratorio de cómputo.
- Seminario impartido por los alumnos (individual o por equipo).
- Se recomienda que las sesiones de taller sean organizadas con base en la resolución de problemas utilizando paquetes computacionales para el cálculo de estructura electrónica de átomos, moléculas y sólidos.

NOMBRE DEL PLAN LICENCIATURA EN QUÍMICA		3/3
CLAVE 2141121	UNIDAD DE DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE QUÍMICA CUÁNTICA APLICADA	

MODALIDADES DE EVALUACIÓN:

Evaluación Global:

- Reporte escrito y presentación oral (al menos tres).
- Pruebas de ejecución (taller de cómputo).
- Tareas periódicas.

La ponderación de todas estas evaluaciones quedará a juicio del profesor.

Evaluación de Recuperación:

- El curso no podrá acreditarse mediante una evaluación de recuperación.

BIBLIOGRAFÍA NECESARIA O RECOMENDABLE:

1. Cramer, C. J., *Essentials of Computational Chemistry*, 2ª Edición, Wiley, 2004.
2. Foresman. J. B. y Frisch, A., *Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods*, 2ª Edición, Gaussian, 1996.
3. Jensen, F., *Introduction to Computational Chemistry*, 2ª Edición, John Wiley & Sons, 2007.
4. Kaxiras, E., *Atomic and Electronic Structure of Solids*, Cambridge University Press, 2003.
5. Koch, W. y Holthausen, M. C., *A Chemist's Guide to Density Functional Theory*, Segunda Edición, Wiley-VCH, 2001.
6. Levine, I. N., *Quantum Chemistry*, 6ª Edición, Prentice Hall, 2008.
7. Martin, R. M., *Electronic Structure: basic Theory and Practical Methods*, Cambridge University Press, 2004.
8. Parr, R. G. y Yang, W., *Density Functional Theory of Atoms and Molecules*, Oxford University Press Inc., 1989.