

UNIDAD	IZTAPALAPA	DIVISION	CIENCIAS BASICAS E INGENIERIA	1 / 4
NOMBRE DEL PLAN LICENCIATURA EN QUIMICA				
CLAVE	UNIDAD DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE		CRED.	9
2141121	QUIMICA CUANTICA APLICADA		TIPO	OPT.
H.TEOR. 3.0	SERIACION		TRIM.	VIII-XII
H.PRAC. 3.0	2141086			

OBJETIVO(S) :

Objetivo General:

Que al final de la UEA 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.

Objetivos Específicos:

Que al final de la UEA 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 polielectrónicos.
- 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



UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA

APROBADO POR EL COLEGIO
ACADEMICO
EN SU SESION NUM. 343

EL SECRETARIO DEL COLEGIO

NOMBRE DEL PLAN LICENCIATURA EN QUIMICA		2/ 4
CLAVE 2141121	QUIMICA CUANTICA APLICADA	

bandas en sólidos.

- Describir los efectos relativistas en la estructura electrónica de átomos, moléculas y sólidos.

CONTENIDO SINTETICO:

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



Casa abierta al tiempo.

UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA

APROBADO POR EL COLEGIO
ACADEMICO
EN SU SESION NUM. 343

EL SECRETARIO DEL COLEGIO.

[Handwritten signature]

7.3 Acoplamiento espín-espín

7.4 Corrección de Darwin

MODALIDADES DE CONDUCCION DEL PROCESO DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE:

1. Clase de teoría en forma de Conferencia magistral.
2. Clase en forma de taller en un laboratorio de cómputo.
3. Seminario impartido por los alumnos (individual o por equipo).
4. 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.

MODALIDADES DE EVALUACION:

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.

BIBLIOGRAFIA 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,



UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA

APROBADO POR EL COLEGIO
ACADEMICO
EN SU SESION NUM. 343EL SECRETARIO DEL COLEGIO
2/4

NOMBRE DEL PLAN LICENCIATURA EN QUIMICA		4 / 4
CLAVE 2141121	QUIMICA CUANTICA APLICADA	

Cambridge University Press, 2004.
8. Parr, R. G. y Yang, W., Density Functional Theory of Atoms and Molecules,
Oxford University Press Inc., 1989.



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA

APROBADO POR EL COLEGIO
ACADEMICO
EN SU SESION NUM. 343

EL SECRETARIO DEL COLEGIO

[Handwritten signature]