

UNIDAD	IZTAPALAPA	DIVISION	CIENCIAS BASICAS E INGENIERIA	1 / 3
NOMBRE DEL PLAN LICENCIATURA EN QUIMICA				
CLAVE	UNIDAD DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE		CRED.	9
2141146	ESTRUCTURA ELECTRONICA		TIPO	OPT.
H. TEOR. 4.0	SERIACION		TRIM.	VI-XII
H. PRAC. 1.0			2141083	

OBJETIVO(S) :

Objetivo General:

Que al final de la UEA el alumno sea capaz de:

Comprender y aplicar los conceptos y métodos relacionados con el estudio de la estructura electrónica de átomos, moléculas y materia condensada.

Objetivos Específicos:

Que al final de la UEA el alumno sea capaz de:

- Describir las características de los métodos más utilizados en cálculos de estructura electrónica basados en la función de onda.
- Describir las características de los métodos más utilizados en cálculos de estructura electrónica basados en la densidad electrónica.
- Aplicar los conceptos y métodos relacionados con el cálculo de estructura electrónica para la determinación e interpretación de propiedades de átomos, moléculas y materia condensada.

CONTENIDO SINTETICO:

1. Métodos para el cálculo de estructura electrónica basados en la función de onda.
2. Métodos para el cálculo de estructura electrónica basados en la densidad electrónica.
3. Aplicación de los métodos relacionados con el cálculo de estructura



UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA

APROBADO POR EL COLEGIO
ACADEMICO
EN SU SESION NUM. 343

EL SECRETARIO DEL COLEGIO

[Handwritten signature]

CLAVE 2141146

ESTRUCTURA ELECTRONICA

electrónica a la determinación de propiedades de átomos, moléculas y materia condensada.

MODALIDADES DE CONDUCCION DEL PROCESO DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE:

1. Clase de teoría en forma de Conferencia magistral.
2. Clase en forma de taller en salas de cómputo.
3. 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.

MODALIDADES DE EVALUACION:

Evaluación Global:

- Pruebas abiertas parciales (al menos dos procurando que sean de carácter acumulativo o integrador).
- Reporte escrito y presentación oral (al menos uno de cada uno).
- Pruebas de ejecución (taller de cómputo).
- Tareas periódicas (al menos tres).

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

Evaluación de Recuperación:

- El curso podrá acreditarse mediante una evaluación de recuperación que podrá ser global o complementaria a juicio del profesor.

BIBLIOGRAFIA NECESARIA O RECOMENDABLE:

1. Cramer, C. J., Essentials of Computational Chemistry, 2a Edición, Wiley, 2004.
2. McWeeny, R., Methods of Molecular Quantum Mechanics, 2a. Edición, Academic Press, 1992.
3. Koch, W. y Holthausen, M. C., A Chemist's Guide to Density Functional Theory, 2a Edición, Wiley-VCH, 2001.
4. Levine, I. N., Quantum Chemistry, 6a Edición, Prentice Hall, 2008.
5. Szabo, A. y Ostlund, N.S., Modern Quantum Chemistry, Dover, 1996.
6. Sholl, D. y Steckel, J. A., Density Functional Theory: A Practical



UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA

APROBADO POR EL COLEGIO
ACADEMICO
EN SU SESION NUM. 343

EL SECRETARIO DEL COLEGIO

NOMBRE DEL PLAN LICENCIATURA EN QUIMICA

3/ 3

CLAVE 2141146

ESTRUCTURA ELECTRONICA

- Introduction, Wiley-Interscience, 2009.
7. Trindle, C. y Shillady, D., Electronic Structure Modeling: Connections Between Theory and Software, CRC Press, 2008.
 8. Artículos de investigación.



Casa abierta al tiempo.

UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA

APROBADO POR EL COLEGIO
ACADEMICO
EN SU SESION NUM. 342

EL SECRETARIO DEL COLEGIO