

UNIDAD	IZTAPALAPA	DIVISION	CIENCIAS BASICAS E INGENIERIA	1 / 3
NOMBRE DEL PLAN LICENCIATURA EN QUIMICA				
CLAVE	UNIDAD DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE		CRED.	9
2141147	TEORIA DE FUNCIONALES DE LA DENSIDAD		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 de la teoría de funcionales de la densidad, así como los criterios de reactividad química que surgen de ésta.

Objetivos Específicos:

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

- Comprender los fundamentos de la teoría de funcionales de la densidad.
- Describir la teoría de Kohn-Sham.
- Conocer las características básicas de las aproximaciones al funcional de intercambio-correlación.
- Comprender los cálculos de estructura electrónica que utilizan el método de Kohn-Sham.
- Describir los criterios de reactividad que surgen de la teoría de funcionales de la densidad.
- Conocer los principios de reactividad química asociados con los criterios anteriores.

**CONTENIDO SINTETICO:**

1. Fundamentos de la teoría de funcionales de la densidad.
2. La teoría de Kohn-Sham.



UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA

APROBADO POR EL COLEGIO  
ACADEMICO  
EN SU SESION NUM. 343

EL SECRETARIO DEL COLEGIO

CLAVE 2141147

TEORIA DE FUNCIONALES DE LA DENSIDAD

3. Aproximaciones al funcional de intercambio-correlación.
4. Aplicaciones al estudio de estructura electrónica de sistemas químicos.
5. Conceptos de reactividad química.
6. Principios de reactividad química.

**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. Chattaraj, P. K., Editor, Chemical Reactivity Theory: A Density Functional View, CRC Press, 2009.
2. Gross, E. K. U. y Dreizler, R., Density Functional Theory, Plenum Press, 1993.



Casa abierta al tiempo.

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 2141147

TEORIA DE FUNCIONALES DE LA DENSIDAD

3. Koch, W. y Holthausen, M. C., A Chemist's Guide to Density Functional Theory, Wiley-VCH, 2001.
4. March, N. H., Electron Density Theory of Many-Electron Systems, Academic Press, 1991.
5. Parr, R.G. y Yang, W., Density -Functional Theory of Atoms and Molecules, Oxford University Press, 1989.
6. Trindle, C. y Shillady, D., Electronic Structure Modeling: Connections Between Theory and Software, CRC Press, 2008.
7. Artículos de investigación.



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA

APROBADO POR EL COLEGIO  
ACADEMICO  
EN SU SESION NUM. 343

EL SECRETARIO DEL COLEGIO