



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA

PROGRAMA DE ESTUDIOS

UNIDAD IZTAPALAPA		DIVISION CIENCIAS BASICAS E INGENIERIA		1/ 2	
NOMBRE DEL PLAN POSGRADO EN QUIMICA					
CLAVE	UNIDAD DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE		CREDITOS	9	
2146034	ESTRUCTURA ATOMICA Y MOLECULAR		TIPO	OBL.	
H. TEOR. 4.5	SERIACION AUTORIZACION		TRIM. I Ó II		
H. PRAC. 0.0					

OBJETIVO(S) :

Objetivo General:

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

Comprender y aplicar los métodos de la mecánica cuántica en sistemas de interés químico.

CONTENIDO SINTETICO:

Momento angular, espín y antisimetría. Métodos aproximados. Teoría de perturbaciones y método variacional. Átomos polieletrónicos.

Estructura molecular:

Aproximación de Born-Oppenheimer. Métodos semiempíricos y ab initio. Teoría de orbitales moleculares en moléculas diatómicas (LCAO). Moléculas poliatómicas. Métodos de Huckel y semiempíricos. Vibración y rotación molecular.

Introducción a la espectroscopía. Teoría de perturbaciones dependiente del tiempo, momento y reglas de selección.

Aplicaciones:

Aplicaciones cualitativas de la teoría de orbitales moleculares. Propiedades eléctricas y magnéticas de moléculas. Reactividad Química.

MODALIDADES DE CONDUCCION DEL PROCESO ENSEÑANZA-APRENDIZAJE:

Exposición oral por parte del profesor y realización de un proyecto de aplicación de los conceptos. Se recomienda dedicar una semana a la revisión



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA

Sa/ri

ADECUACION
PRESENTADA AL COLEGIO ACADEMICO
EN SU SESION NUM. 323

EL SECRETARIO DEL COLEGIO

CLAVE 2146034

ESTRUCTURA ATOMICA Y MOLECULAR

de los conceptos relacionados con el sistema de una partícula y al menos dos semanas a las aplicaciones.

MODALIDADES DE EVALUACION:

Se sugiere la aplicación de al menos dos evaluaciones escritas además de la discusión de un proyecto.

BIBLIOGRAFIA NECESARIA O RECOMENDABLE:

1. Atkins P. W., Friedman R.S., "Molecular Quantum Mechanics", 3a. ed., Oxford 1996.
2. Pilar F. L., "Elementary Quantum Chemistry" 2a. ed., McGraw Hill.



UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA

ADECUACION

PRESENTADA AL COLEGIO ACADEMICO
EN SU SESION NUM. 323

EL SECRETARIO DEL COLEGIO