



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA

DSE-11 5M0798

PROGRAMA DE ESTUDIOS

1 / 2

UNIDAD IZTAPALAPA		DIVISION CIENCIAS BASICAS E INGENIERIA	
NIVEL MAESTRIA		EN CIENCIAS (QUIMICA)	
CLAVE 214653	UNIDAD ENSEÑANZA-APRENDIZAJE Teoría de Funcionales de la Densidad		TRIM. III ó IV
HORAS TEORIA 4.5	SERIACION Autorización		CREDITOS 9
HORAS PRACTICA 0.0			OPT./OBL. OPT.

OBJETIVO (S) :

Que el alumno:

Comprenda los fundamentos de la teoría de funcionales de la densidad de Atomos y Moléculas.

Comprender los conceptos de reactividad química generados dentro del marco de la teoría de funcionales de la densidad.

Aplique la teoría de funcionales de la densidad a casos seleccionados.

CONTENIDO SINTETICO:

Matrices de densidad.  
Teoría de funcionales de la densidad.  
Método de Kohn y Sham.  
Reactividad química.

MODALIDADES DE CONDUCCION DEL PROCESO DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE:

Exposición oral del profesor complementada, si el profesor lo considera necesario, con la presentación de seminarios por parte del alumno. Análisis y discusión de artículos de investigación y revisión bibliográfica.



UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA  
Edmundo Jacdo P.

APROBADO POR EL COLEGIO ACADEMICO  
EN SU SESION NUM. 208  
EL SECRETARIO DEL COLEGIO



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA

DSE-11 5M0798

PROGRAMA DE ESTUDIOS

2 / 2

UNIDAD IZTAPALAPA		DIVISION CIENCIAS BASICAS E INGENIERIA	
NIVEL MAESTRIA		EN CIENCIAS (QUIMICA)	
CLAVE 214653	UNIDAD ENSEÑANZA-APRENDIZAJE Teoría de Funcionales de la Densidad		TRIM. III ó IV
HORAS TEORIA 4.5	SERIACION Autorización		CREDITOS 9
HORAS PRACTICA 0.0			OPT./OBL. OPT.

MODALIDADES DE EVALUACION:

Evaluaciones periódicas.

Quedará a juicio del profesor la aplicación de las siguientes modalidades adicionales:

Evaluación global final, presentación de seminarios por parte de los alumnos y entrega de reportes y tareas.

En su caso, el profesor ponderará a su criterio la contribución de cada una de las modalidades elegidas a la calificación final.

BIBLIOGRAFIA NECESARIA O RECOMENDABLE:

R. G. PARR and W. YANG., "Density Functional Theory of Atoms Molecules", Oxford, 1989.

J. M. SEMINARIO and POLITZER, "Modern Density Functional Theory: A Tool for Chemistry" Elsevier, 1995.

S. LUNDQVIST and N. H. MARCH, "Theory of the Inhomogeneous Electron Gas, Plenum, 1983.

E. K. U. GROSS and R. DREIZLER, "Density Functional Theory", Springer, 1993.

N. H. MARCH, "Electron Density of Many Electron Systems", Academic, 1991.



UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA

Ramón Beltrán

APROBADO POR EL COLEGIO ACADEMICO  
EN SU SESION NUM. 208

EL SECRETARIO DEL COLEGIO

SELLO