



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 214655	UNIDAD ENSEÑANZA-APRENDIZAJE Fisicoquímica Computacional		TRIM. III ó IV
HORAS TEORIA 4.5	SERIACION Autorización		CREDITOS 9
HORAS PRACTICA 0.0			OPT./OBL. OPT.

OBJETIVO (S) :

Que el alumno capaz de usar y entender los diversos métodos teóricos para estudiar reactividad química y termodinámica molecular mediante el uso de paquetes comerciales.

Que el alumno comprenda cómo los métodos teóricos pueden apoyar el trabajo experimental.

CONTENIDO SINTETICO:

Métodos semiempíricos.  
 Métodos Hartree-Fock.  
 Métodos post Hartree-Fock.  
 Métodos de optimización de geometría y búsqueda de estados de transición.  
 Aplicaciones a reactividad química y determinación de propiedades físicas.  
 Espectros moleculares.  
 Mecanismos de reacción.  
 Efecto de disolvente.  
 Funciones de partición molecular.

MODALIDADES DE CONDUCCION DEL PROCESO DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE:

Clases impartidas por el profesor y sesiones en el laboratorio de cómputo.



UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA

Edmundo Jaco H.

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 214655	UNIDAD ENSEÑANZA-APRENDIZAJE Fisicoquímica Computacional		TRIM. III ó IV
HORAS TEORIA 4.5	SERIACION Autorización		CREDITOS 9
HORAS PRACTICA 0.0			OPT./OBL. OPT.

MODALIDADES DE EVALUACION:

Presentación y discusión de proyectos realizados mediante el uso de herramientas aprendidas.

BIBLIOGRAFIA NECESARIA O RECOMENDABLE:

M. J. FRISCH, A. FRISCH J. B. FORESMAN, "Gaussian 94 User's Guide Reference", Ed. Gaussian, Inc. 1996.

J. B. FORESMAN Y A FRISCH, "Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods" Gaussian, Inc., 1996.

K. D. LIPKOWINTZ y D. B., "Reviews in Computational Chemistry", vol. I y II, VCH Publishers, Inc. 1990.



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

*Edmundo Jacinto H.*

APROBADO POR EL COLEGIO ACADÉMICO

EN SU SESION NUM. 208

EL SECRETARIO DEL COLEGIO

SELLO