

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
FACULTAD DE QUÍMICA

PROGRAMAS DE ESTUDIO
SÉPTIMO, OCTAVO O NOVENO SEMESTRE

Asignatura: QUÍMICA COMPUTACIONAL	Ciclo: TERMINAL Y DE PRE ESPECIALIZACIÓN	Campo de Estudio: QUÍMICA CUÁNTICA (FISICOQUÍMICA)	Departamento: FÍSICA Y QUÍMICA TEÓRICA
HORAS/SEMANA/SEMESTRE			

OPTATIVA	CLAVE 0088	TEORÍA 3 h/48h	PRÁCTICA 0 h	CRÉDITOS 6
Tipo de asignatura:			TEÓRICA	
Modalidad de la Asignatura			CURSO	
ASIGNATURA PRECEDENTE: Seriación indicativa con Química Cuántica II				
ASIGNATURA SUBSECUENTE: Ninguna				
OBJETIVO(S): En este curso se presentarán los conceptos y técnicas de uso común para abordar el estudio teórico de la estructura de átomos, moléculas y sistemas periódicos, así como de la reactividad química y la espectroscopia molecular. Se espera que el alumno adquiera los conocimientos que le permitan entender las bases teóricas, los alcances y limitaciones de las diferentes metodologías empleadas actualmente para la descripción teórica de los sistemas de interés químico. Asimismo, el alumno adquirirá, mediante la realización de proyectos asociados a las diferentes unidades, la habilidad en el uso de algunos de los programas computacionales empleados dentro del campo de la química computacional.				

UNIDADES TEMÁTICAS

NÚMERO DE HORAS POR UNIDAD	UNIDAD
12T 12H	1. Fundamentos teóricos. Ecuación de Schrödinger. Aproximación de Born-Oppenheimer. Superficies de energía potencial Aproximación de electrones independientes. Principio de antisimetría. Aproximación Hartree-Fock Correlación electrónica. Teoría de Funcionales de la Densidad.
6T 12H	2. Estructura electrónica de átomos y moléculas.
30T 30H	3. Tópicos selectos: Sistemas periódicos; Descripción teórica de la reactividad química; Espectroscopia molecular.

TOTAL 48T=48H

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA
1. A.R. Leach, Molecular Modelling. Principles and Applications, 2nd Edition, Prentice Hall, 2001.
2. C. J. Cramer, Essentials of Computational Chemistry. Theory and Models, 2 nd Edition, John Wiley & Sons, 2004.
3. E. G. Lewars, Computational Chemistry. Introduction to the theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics, Kluwer Academic Publishers, 2nd Edition, 2011.

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

1. I. N. Levine, Quantum Chemistry, 7a Ed, New Jersey, Prentice Hall, 2013.
2. D. A. McQuarrie y J. D. Simon, Physical Chemistry: A Molecular Approach, University Science Books, 1997.
3. J. P. Lowe y K.A. Peterson, Quantum Chemistry, 3er Edición, Elsevier Academic Press, 2005.

SUGERENCIAS DIDÁCTICAS

La metodología de trabajo contiene tanto exposición teórica como proyectos a realizar por los alumnos. En todo el curso se usan ejercicios computacionales como una forma de práctica en la que se pueden involucrar otros profesores expertos en temas específicos. Se recomienda revisar al menos dos de los tres tópicos selectos comprendidos en la Unidad 3 del temario.

FORMA DE EVALUAR

Exámenes parciales y finales, proyectos.

PERFIL PROFESIOGRÁFICO DE QUIENES PUEDEN IMPARTIR LA ASIGNATURA

Químicos con especialidad en química cuántica.