



UNIDAD: <b>IZTAPALAPA</b>		DIVISIÓN <b>CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERÍA</b>	
NIVEL: <b>LICENCIATURA</b>		EN <b>QUÍMICA</b>	
CLAVE: <b>2141147</b>	UNIDAD DE ENSEÑANZA - APRENDIZAJE: <b>TEORÍA DE FUNCIONALES DE LA DENSIDAD</b>		TRIM: <b>VI-XII</b>
HORAS TEORÍA: 4	SERIACIÓN <b>2141083</b>		CRÉDITOS: <b>9</b>
HORAS PRÁCTICA: 1			OPT/OBL: <b>OPT.</b>

**OBJETIVO(S):****GENERAL**

- Que al final del curso 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.

**ESPECÍFICOS**

Que al final del curso 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 SINTÉTICO:**

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

<b>NOMBRE DEL PLAN</b>		<b>LICENCIATURA EN QUÍMICA</b>	<b>2/2</b>
<b>CLAVE</b> 2141147	<b>UNIDAD DE DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE</b> <b>TEORÍA DE FUNCIONALES DE LA DENSIDAD</b>		

**MODALIDADES DE CONDUCCIÓN DEL PROCESO DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE:**

- Clase de teoría en forma de Conferencia magistral.
- Clase en forma de taller en salas de cómputo.
- 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 EVALUACIÓN:**

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.

**BIBLIOGRAFÍA 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.
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.