

UNIDAD: IZTAPALAPA		DIVISIÓN CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERÍA	
NIVEL: LICENCIATURA		EN QUÍMICA	
CLAVE: 2141146	UNIDAD DE ENSEÑANZA - APRENDIZAJE: ESTRUCTURA ELECTRÓNICA		TRIM: VI-XII
HORAS TEORÍA: 4	SERIACIÓN 2141083		CRÉDITOS: 9
HORAS PRÁCTICA: 1			OPT/OBL: OPT.

OBJETIVO(S):

GENERAL

- Que al final del curso el alumno sea capaz de comprender y aplicar los conceptos y métodos relacionados con el estudio de la estructura electrónica de átomos, moléculas y materia condensada.

ESPECÍFICOS

Que al final del curso el alumno sea capaz de:

- Describir las características de los métodos más utilizados en cálculos de estructura electrónica basados en la función de onda.
- Describir las características de los métodos más utilizados en cálculos de estructura electrónica basados en la densidad electrónica.
- Aplicar los conceptos y métodos relacionados con el cálculo de estructura electrónica para la determinación e interpretación de propiedades de átomos, moléculas y materia condensada.

CONTENIDO SINTÉTICO:

1. Métodos para el cálculo de estructura electrónica basados en la función de onda.
2. Métodos para el cálculo de estructura electrónica basados en la densidad electrónica.
3. Aplicación de los métodos relacionados con el cálculo de estructura electrónica a la determinación de propiedades de átomos, moléculas y materia condensada.

NOMBRE DEL PLAN		LICENCIATURA EN QUÍMICA	2/2
CLAVE 2141146	UNIDAD DE DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE ESTRUCTURA ELECTRÓNICA		

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. Cramer, C. J., *Essentials of Computational Chemistry*, 2ª Edición, Wiley, 2004.
2. McWeeny, R., *Methods of Molecular Quantum Mechanics*, 2ª. Edición, Academic Press, 1992.
3. Koch, W. y Holthausen, M. C., *A Chemist's Guide to Density Functional Theory*, 2ª Edición, Wiley-VCH, 2001.
4. Levine, I. N., *Quantum Chemistry*, 6ª Edición, Prentice Hall, 2008.
5. Szabo, A. y Ostlund, N.S., *Modern Quantum Chemistry*, Dover, 1996.
6. Sholl, D. y Steckel, J. A., *Density Functional Theory: A Practical Introduction*, Wiley-Interscience, 2009.
7. Trindle, C. y Shillady, D., *Electronic Structure Modeling: Connections Between Theory and Software*, CRC Press, 2008.
8. Artículos de investigación.