

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
FACULTAD DE QUÍMICA

PROGRAMAS DE ESTUDIO
SEPTIMO SEMESTRE

Asignatura QUÍMICA CUÁNTICA II	Ciclo TERMINALES Y DE PRE ESPECIALIZACIÓN	Área FÍSICA Y QUÍMICA TEÓRICA	Departamento FÍSICA Y QUÍMICA TEÓRICA
--	--	--	--

HORAS/SEMANA/SEMESTRE

OPTATIVO	Clave 0038	TEORÍA 3h/48h	PROBLEMAS 0 h	PRÁCTICA 4 h/64h	CRÉDITOS 10
-----------------	----------------------	----------------------	----------------------	----------------------------	-----------------------

Tipo de asignatura:	TEÓRICA-PRÁCTICA
Modalidad de la asignatura:	CURSO

ASIGNATURA PRECEDENTE: Ninguna

ASIGNATURA SUBSECUENTE: Ninguna

OBJETIVO(S):

En este curso se presentarán los conceptos y técnicas avanzadas de uso ya común para comprender el enlace químico y predecir las propiedades y reactividad de moléculas. Este curso complementa y extiende el de Química Cuántica I y es la puerta de entrada para el estudio serio del modelado molecular.

UNIDADES TEMÁTICAS

NÚMERO DE HORAS POR UNIDAD	UNIDAD
5T-6P 11 H	1. Revisión de Mecánica Cuántica
6T-8P 14 H	2. Teoría de momento angular 2.1. esquemas de acoplamiento 2.2. átomos 2.3. moléculas
5T-6P 11	3. Método Hartree-Fock
5T-6P 11	4. La correlación electrónica 4.1. Interacción de configuraciones 4.2. Método de campo autoconsistente multiconfiguracional 4.3. Método de campo autoconsistente en espacio activo completo 4.4. Teoría de perturbaciones de Moller-Plesset
6T-8P 14	5. Método de los funcionales de la densidad electrónica
3T-5P 8	6. Análisis de Poblaciones
5T-7P 12	7. Teoría de átomos en moléculas
4T-6P 10	8. Potenciales electrostáticos
4T-6P 10	9. Superficies de energía potencial, acoplamiento electrón-vibración
5T-6P 11	10. Elementos de Fotoquímica

SUMA 48T-64P=112H

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

1. Levine, I. N., Quantum Chemistry, 7a Ed, New Jersey, Prentice Hall, 2013.
2. Atkins, P. W. y Friedman, R. S., Molecular Quantum Mechanics, 5a. ed, Oxford University press, 2010
3. McQuarrie, D. A. y Simon, J. D., Physical Chemistry: A Molecular Approach, University Science Books, 1997.
4. Lowe, J. P. y Peterson, K. A. Quantum Chemistry, 3ra. Ed, Elsevier, Academic Press, 2005.

BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTARIA:

1. Grinter, R., The Quantum in Chemistry: An Experimentalist's View. John Willey & Sons Ltd. West Sussex, England (2005).

SUGERENCIAS DIDÁCTICAS

En todo el curso se usan ejercicios computacionales como una forma específica de práctica, y es posible graduar su complejidad a las capacidades y a los intereses específicos del alumno.

FORMA DE EVALUAR

Exámenes parciales, finales y proyecto.

PERFIL PROFESIOGRÁFICO DE QUIENES PUEDEN IMPARTIR LA ASIGNATURA

Químicos con especialidad en química cuántica.