



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA

PROGRAMA DE ESTUDIOS

--	--

UNIDAD IZTAPALAPA	DIVISION C.B.I.
----------------------	--------------------

POSGRADO EN QUÍMICA	TRIMESTRE I
---------------------	----------------

CLAVE 214634	UNIDAD DE ENSEÑANZA APRENDIZAJE Estructura Atómica y Molecular. OBL. (X) OPT. ()	CREDITOS 9
-----------------	---	---------------

HORAS TEORIA 4.5	HORAS PRACTICA	SERIACION Autorización
---------------------	-------------------	---------------------------

OBJETIVO(S) Que el alumno comprenda y aplique los métodos de la mecánica cuántica en sistemas de interés químico.
--

CONTENIDO SINTETICO. Momento angular, espín y antisimetría. Métodos aproximados. Teoría de perturbaciones y método variacional. Átomos polieletrónicos. Estructura molecular: Aproximación de Born-Oppenheimer. Métodos semiempíricos y <i>ab initio</i> . Teoría de orbitales moleculares en moléculas diatómicas (LCAO). Moléculas poliatómicas. Métodos de Huckel y semiempíricos. Vibración y rotación molecular. Introducción a la espectroscopía. Teoría de perturbaciones dependiente del tiempo, momento y reglas de selección. Aplicaciones: Aplicaciones cualitativas de la teoría de orbitales moleculares. Propiedades eléctricas y magnéticas de moléculas. Reactividad química.
--



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA

MODALIDADES DE CONDUCCION DEL PROCESO DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE

Exposición oral por parte del profesor y realización de un proyecto de aplicación de los conceptos. Se recomienda dedicar una semana a la revisión de los conceptos relacionados con sistemas de una partícula y al menos dos semanas a las aplicaciones.

MODALIDADES DE EVALUACION

Se sugiere la aplicación de al menos dos evaluaciones escritas además de la discusión de un proyecto.

BIBLIOGRAFIA.

Atkins, P.W., Friedman, R.S., Molecular Quantum Mechanics, 3^a. edn., Oxford, 1996.
Pilar, F.L., Elementary Quantum Chemistry, 2^a. Ed., McGraw Hill, 1990.

SELLO