



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA

PROGRAMA DE ESTUDIOS

--	--

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

POSGRADO EN QUÍMICA	TRIMESTRE III ó IV
---------------------	-----------------------

CLAVE 214655	UNIDAD DE ENSEÑANZA APRENDIZAJE Fisicoquímica Computacional.	OBL. () OPT. (X)	CREDITOS 9
-----------------	---	-------------------	---------------

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

<p>OBJETIVO(S)</p> <p>Que el alumno sea capaz de usar y entender los diversos métodos teóricos para estudiar reactividad química y termodinámica molecular mediante el uso de paquetes comerciales.</p> <p>Que el alumno comprenda cómo los métodos teóricos pueden apoyar el trabajo experimental.</p>
--

<p>CONTENIDO SINTETICO</p> <p>Métodos semiempíricos. Métodos Hartree-Fock Métodos post Hartree-Fock Métodos de optimización de geometría y búsqueda de estados de transición. Aplicaciones a reactividad química y determinación de propiedades físicas. Espectros moleculares. Mecanismos de reacción. Efecto de disolvente. Funciones de partición molecular.</p>
--

<p>MODALIDADES DE CONDUCCION DEL PROCESO DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE</p> <p>Clases impartidas por el profesor y sesiones en el laboratorio de cómputo.</p>
--

<p>MODALIDADES DE EVALUACION</p> <p>Presentación y discusión de proyectos realizados mediante el uso de las herramientas aprendidas.</p>



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA

BIBLIOGRAFIA

- M.J. Frisch, A. Frisch, J.B. Foresman, Gaussian 94 User's Guide Reference, Ed. Gaussian, Inc., 1996.
J.B. Foresman y A. Frisch, Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods, Gaussian, Inc., 1996.
K.D. Lipkowitz y D.B. Boyd, Reviews in Computational Chemistry, Vol. I y II, VCH Publishers, Inc., 1990.

SELLO