



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA

PROGRAMA DE ESTUDIOS

--	--

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

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

CLAVE 214653	UNIDAD DE ENSEÑANZA APRENDIZAJE Teoría de Funcionales de la Densidad.	OBL. () OPT. (X)	CREDITOS 9
-----------------	--	---------------------	---------------

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

OBJETIVO(S)

Que el alumno:

Comprenda los fundamentos de la teoría de funcionales de la densidad de Átomos y Moléculas.
 Comprender los conceptos de reactividad química generados dentro del marco de la teoría de funcionales de la densidad.
 Aplique la teoría de funcionales de la densidad a casos seleccionados.

CONTENIDO SINTETICO.

Matrices de densidad.
 Teoría de funcionales de la densidad.
 Método de Kohn y Sham.
 Reactividad química.

MODALIDADES DE CONDUCCION DEL PROCESO DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE

Exposición oral del profesor complementario, si el profesor lo considera necesario, con la presentación de seminarios por parte del alumno. Análisis y discusión de artículos de investigación y revisión bibliográfica.

MODALIDADES DE EVALUACION

Evaluaciones periódicas
 Quedará a juicio del profesor la aplicación de las siguientes modalidades adicionales: evaluación global final, presentación de seminarios por parte de los alumnos y entrega de reportes y tareas. En su caso, el profesor ponderará a su criterio la contribución de cada una de las modalidades elegidas a la calificación final.



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA

BIBLIOGRAFIA.

- R.G. Parr and W. Yang, Density Functional Theory of Atoms and Molecules, Oxford, 1989.
J.M. Seminario and P. Politzer, Modern Density Functional Theory: A Tool for Chemistry, Elsevier, 1995.
S. Lundqvist and N.H. March, Theory of the Inhomogeneous Electron Gas, Plenum, 1983.
E.K.U. Gross and R. Dreizler, Density Functional Theory, Springer 1993.
N.H. March, Electron Density of Many Electron Systems, Academic, 1991.

SELLO