

Química Cuántica II (214108)

Andrés Cedillo (AT-250)

Objetivos

Que el alumno:

Aplice los métodos de la mecánica cuántica a los sistemas de interés químico
Conozca los principales métodos que se usan actualmente en el campo de la química computacional

Temario

1. Métodos aproximados: método variacional, teoría de perturbaciones
2. Átomos polieletrónicos: aproximación hidrogenoide, método de Hartree-Fock
3. Moléculas: métodos a primeros principio y semiempíricos, aplicaciones

Bibliografía

- 1) Pilar, FL
Elementary Quantum Chemistry
2nd ed, McGraw (1990)
- 2) Atkins, PW and Friedman, RS
Molecular Quantum Mechanics
3rd ed, Oxford (1997)
- 3) Dykstra, CE
Quantum Mechanics and Molecular Spectroscopy
Prentice (1992)
- 4) Levine, IN
Quantum Chemistry
5th ed, Prentice (1999)
- 5) Ratner, MA and Schatz, GC
Introduction to Quantum Mechanics in Chemistry
Prentice Hall (2000)
- 6) Fitts, DD
Principles of Quantum Mechanics: as applied to Chemistry and Chemical Physics
Cambridge (1999)

Evaluación

evaluaciones semanales

La calificación de cada evaluación provendrá del número de problemas y proyectos de cada sesión. Los problemas se entregarán únicamente en la primera sesión de cada semana y no se contabilizarán problemas atrasados.

Escala de calificaciones

MB: 87-100

B: 74-86

S: 60-73

NA: 0-59

Trimestre 01-O, CH-19

Horario:	Lu, Mi, Vi	9:30-11:00	AT-236
Asesoría:	Lu, Mi, Vi	9:00-9:30	AT-250