

Curso de Fisicoquímica IV

Profesor: Jorge Garza. Oficina: AT-248

Horario: Lunes 12:00-14:00 (C107), Miércoles 12:00-14:00 (C117)

Asesoría: Viernes de 14 a 16 hrs.

1. Teoría cuántica: Introducción y principios
 - a) Los orígenes de la mecánica cuántica.
 - b) La dinámica de sistemas microscópicos.
 - c) Los principios de la mecánica cuántica.
2. Teoría cuántica: Técnicas y aplicaciones.
 - a) Movimiento translacional.
 - b) Movimiento vibracional.
 - c) Movimiento rotacional.
3. Estructura de átomos hidrogenoides.
4. Métodos aproximados
 - a) El método variacional
 - 1) Principio variacional.
 - 2) Combinación lineal de funciones.
 - b) Teoría de perturbaciones.
5. Espín y principio de exclusión de Pauli.
6. La aproximación de Born-Oppenheimer.
7. El método de Hartree-Fock
 - a) Ecuaciones de Hartree-Fock-Roothaan.
 - b) Funciones de base.
8. Métodos para el cálculo de estructura electrónica en átomos y moléculas.
 - a) Método de Hartree-Fock.
 - b) Correlación electrónica.
9. Propiedades moleculares.
 - a) Geometrías óptimas.
 - b) Frecuencias vibracionales.
 - c) Energías de reacción.

Libro de texto:

Atkins, P. W. y De Paula, J., Atkins Physical Chemistry, 8^a Edición, W. H. Freeman, 2006.

Evaluación : Exámenes (50 %), tareas y participación (50 %)

Calificación : 0-5.9, NA. 6-7.3, S. 7.4-8.6, B. 8.7-10.0, MB.