

Estructura atómica y molecular (214634)

Andrés Cedillo (AT-250)

Objetivos

Que el alumno:

Comprenda y aplique los métodos de la mecánica cuántica a los sistemas de interés químico

Conozca los fundamentos de los principales métodos que se usan actualmente en el campo de la química computacional

Temario

1. Momento angular
 - propiedades generales
 - momento angular de espín
 - suma de momentos angulares
2. Métodos aproximados
 - método variacional
 - teoría de perturbaciones
3. Átomos polielectrónicos
 - estructura atómica
 - espectro de un átomo
4. Moléculas
 - métodos moleculares
 - introducción a la espectroscopía
5. Aplicaciones
 - propiedades eléctricas y magnéticas
 - reactividad química

Bibliografía

Dykstra, CE
Quantum Mechanics and Molecular Spectroscopy
Prentice (1992)

Atkins, PW and Friedman, RS
Molecular Quantum Mechanics
3rd ed, Oxford (1997)

Pilar, FL
Elementary Quantum Chemistry
2nd ed, McGraw (1990)

Referencia

Levine, IN
Química Cuántica
5a ed, Prentice (2001)

Ratner, MA and Schatz, GC
Introduction to Quantum Mechanics in Chemistry
Prentice (2000)

Fitts, DD
Principles of Quantum Mechanics: as applied to Chemistry and Chemical Physics
Cambridge (1999)

Evaluación

Se realizarán cinco exámenes parciales, uno por cada tema, aproximadamente en las semanas 3, 6, 8, 10, 12. La calificación final será el promedio de las evaluaciones parciales.

Escala de calificaciones

MB: 87-100

B: 74-86

S: 60-73

NA: 0-59

Trimestre 04-P

Horario: Lu, Mi, Ju 11:00-12:30 EP-107

Asesoría: Lu, Mi, Ju 9:00-9:30 AT-250