

Métodos en Química Teórica/ Química 2004

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES CUAUTITLAN

LICENCIATURA EN: QUÍMICA.

NOMBRE DE LA ASIGNATURA: MÉTODOS EN QUÍMICA TEÓRICA.

ÓRGANO INTERNO QUE COORDINA EL PROGRAMA DE LA ASIGNATURA:

DEPARTAMENTO DE: CIENCIAS QUÍMICAS.
SECCIÓN DE: FISICOQUÍMICA.

CICLO AL QUE PERTENECE: CICLO TERMINAL.

REQUISITO DE SERIACIÓN: NINGUNO.

CARÁCTER DE LA ASIGNATURA: OPTATIVA.

TIPO DE ASIGNATURA: TEÓRICO.

MODALIDAD: CURSO.

SEMESTRE: 8°.

NÚMERO DE HORAS /SEMANA/ SEMESTRE:

TEORÍA:

3

PRÁCTICA:

N° DE CRÉDITOS:

6

CLAVE

0802

Métodos en Química Teórica/ Química 2004

OBJETIVO GENERAL DE LA ASIGNATURA.

Profundizar en aspectos teóricos y metodológicos de los métodos mecánico-cuánticos mas importantes.

UNIDAD 1: EL MÉTODO DE HARTREE-FOCK-ROOTHAANN.

Número de horas de teoría: 8.

OBJETIVO DE LA UNIDAD.

Comprender en detalle el formalismo en que se basa el Método de Hartree Fock.

1.1 Revisión de los postulados y el formalismo de la Mecánica Cuántica.

1.2 El Método Variacional Lineal.

1.3 El Método de Hartree-Fock-Roothaann.

1.3.1 Desarrollo.

1.3.2 Importancia.

UNIDAD 2: FUNCIONES BASE.

Número de horas de teoría: 6.

OBJETIVO DE LA UNIDAD.

Comprender la estructura de las funciones base mas utilizadas en la actualidad y evaluar sus ventajas, desventajas y límites de aplicación.

2.1 Funciones Moleculares como combinación lineal de funciones atómicas.(OM-CLOA).

2.2 Funciones tipo Slater.

2.3 Funciones Gaussianas.

2.3.1 Ventajas.

2.3.2 Tipos de funciones Gaussianas. Estructura. Aplicaciones.

UNIDAD 3: MÉTODOS POS-HARTREE FOCK.

Número de horas de teoría: 8.

OBJETIVO DE LA UNIDAD.

Explicar las técnicas más importantes para considerar la correlación electrónica en el método de HF.

3.1 Limitaciones del Método de Hartree Fock. El factor de correlación electrónica.

3.2 Los métodos de Interacción de Configuración (IC).

3.3 El método Perturbativo de Moller Plesset (MP).

3.4 El método de clusters acoplados.

UNIDAD 4: MÉTODOS SEMIEMPÍRICOS.

Número de horas de teoría: 8.

OBJETIVO DE LA UNIDAD.

Diferenciar las principales aproximaciones de los métodos semiempíricos en su desarrollo histórico hasta la actualidad, y obtener elementos que les permitan evaluar críticamente sus ventajas, desventajas y limitaciones.

4.1 Desarrollo histórico.

4.1.1 Métodos de Hückel y Hückel Extendido.

4.1.1 Los métodos CNDO e INDO.

4.1.2 Los métodos MINDO.

4.1.3 El método MNDO .

Métodos en Química Teórica/ Química 2004

4.2 Métodos derivados del MNDO.

- 4.2.1 Método AM1 .
- 4.2.2 Métodos PM3.
- 4.2.3 Método SAM1.

UNIDAD 5: INTRODUCCIÓN A LA TEORÍA DE FUNCIONALES DE LA DENSIDAD (TFD).

Número de horas de teoría: 12.

OBJETIVO DE LA UNIDAD.

Comprender en detalle el formalismo en que se basa la Teoría de Funcionales de la Densidad, y obtener elementos para evaluar la efectividad de los potenciales de intercambio y correlación más utilizados.

5.1 Antecedentes.

5.2 Teoremas de Hohenberg y Kohn. La función densidad de probabilidad electrónica.

5.3 El funcional de la Energía. Funcionales de intercambio y correlación.

5.4. Aproximaciones al Funcional de intercambio y correlación. Potenciales de intercambio y correlación más usados.

5.4.1 Aproximación de densidad local de espín (LSDA y LDA).

5.4.2 Método $X\alpha$.

5.4.3 Método del Gradiente Corregido (CG).

UNIDAD 6. MECÁNICA Y DINÁMICA MOLECULAR.

Número de horas de teoría: 6.

OBJETIVO DE LA UNIDAD.

Comprender los fundamentos de la Mecánica y Dinámica Molecular y sus Aplicaciones.

6.1 Fundamentos de Mecánica Molecular.

6.1.1 Métodos MM2 y MM3.

6.2 Fundamentos de Dinámica Molecular.

6.3 Método de Carr y Parrinello.

METODOLOGÍA DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE.

Mínima exposición del profesor, la cual debe ser de una o dos clases por tema y debatir el contenido a través de seminarios en donde se discutan artículos de revistas y *actividades prácticas donde se desarrollen ejercicios y problemas* (analicen ejemplos de los libros). Se recomienda el uso de acetatos, diapositivas, u otros medios audiovisuales en los que los mismos estudiantes puedan apoyarse para su exposición.

Esta técnica de enseñanza, requieren de la participación activa del estudiante y de sesiones de asesorías por parte del profesor, y tienen la ventaja de desarrollar en el estudiante habilidades importantes para su futura acción profesional como son la exposición oral, y la capacidad de sintetizar, analizar y generalizar, entre otras.

Tanto en los seminarios como en las actividades prácticas será obligado el uso de paquetes computacionales.

Métodos en Química Teórica/ Química 2004

PROPUESTA DE EVALUACIÓN.

Una evaluación escrita de conceptos generales, *además de* la participación en los Seminarios y *actividades prácticas*.

PERFIL PROFESIOGRÁFICO DEL DOCENTE.

Maestría en Físicoquímica ó Doctorado en Ciencias Químicas ambos con orientación hacia la Química Teórica.

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA.

1. Levine, L. *Química cuántica*, 3^{a.}, Prentice Hall, USA, 2002.
2. Messiah, A. *Quantum mechanics*, Dover, New York, 2000.
3. Pilar, F.L., *Elementary quantum chemistry*, 2^{a.}, Dover, New York, 2000.
4. Schatz, G.C. y M.A. Ratner. *Quantum mechanics in chemistry*, Dover, New York, 2002.
5. Szabo, A. *Modern Quantum chemistry: Introduction to advanced electronic structure Theory*, Dover, New York, 1996.

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

1. Ellis, D. *Density Functional Theory of molecules, cluster and solids*, Kluwer Academic Publishers, USA, 2002.
2. Gao, J. y M.A. Thompson. *Combined quantum mechanical and molecular mechanical methods*, American Chemical Society, Symposium Series 712, Washington, 1998.
3. Nogueira, F., M. Marques y C. Fiolhais. *A primer density functional theory*, Springer-Verlag, New York, 2003.
4. Haile, J.M. *Molecular dynamics simulations*, Wiley-Interscience, New York, 1997.
5. Gerlings, P. y F. de Proft. *Density functional theory: A bridge between chemistry and physics*, Univ. Press Amsterdam, Amsterdam, 1998.