



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO  
PROGRAMA DE  
MAESTRIA Y DOCTORADO EN CIENCIAS QUIMICAS



Programa de actividad académica

<b>Nombre de la asignatura: Mathematical Methods for Quantum Chemistry</b>			
Clave:	Semestre: Fall 2021	Campo de conocimiento: Química	No. Créditos:
Carácter: Optativa de elección		Horas por semana	Total horas/ semana
Tipo: Teórico	Teoría:	Práctica:	Total horas/ semestre
	48	0	
Modalidad: CURSO		Duración del programa: 16 semanas	

<b>Actividad académica con seriación antecedente:</b>
<b>Objetivo general:</b> Exposure to general mathematical approaches used in quantum chemistry.
<b>Objetivos específicos:</b> An overview of linear algebra techniques, solving ordinary and partial differential equations. Specific topics that will be covered include determining eigenvalues, basis set expansions, Sturm-Liouville problem, properties of orthogonal polynomials, solving ordinary and partial differential equations with emphasis on applicability to the electronic Schrödinger equation.

Índice temático			
Unidad	Tema	Horas	
		Teóricas	Prácticas
1	Linear Algebra and Vector Spaces	6	
2	Matrices and Eigenvalue Problems	6	
3	Ordinary Differential Equations	6	
4	Series Solutions to Differential Equations	6	
5	Orthogonal Polynomials and Sturm-Liouville Problems	6	
6	Partial Differential Equations	6	
7	Schrodinger Equation: Exactly Soluble Problems	6	
8	Electronic Schrödinger Equation	6	
<b>Total de horas teóricas:</b>		<b>48</b>	
<b>Total de horas prácticas:</b>			
<b>Suma total de horas:</b>		<b>48</b>	

<b>Bibliografía básica actualizada:</b> Mathematical methods for scientists and engineers, McQuarrie, Donald A., University Science Books, [2003]	
<b>Bibliografía complementaria:</b> Mathematical Methods for Physics and Engineering, Riley, K. F., Hobson M. P., and Bence S. J., Cambridge University Press, [2006]	
<b>Sugerencias didácticas:</b>	<b>Mecanismos de evaluación del aprendizaje de los alumnos:</b>
Exposición oral (X )	Exámenes parciales (X)
Exposición audiovisual ( )	Examen final escrito (X)
Ejercicios dentro de clase ( )	Trabajos y tareas fuera del aula (X)
Ejercicios fuera del aula (X)	Exposición de seminarios por los alumnos ( )
Seminarios ( )	Participación en clase ( )
Lecturas obligatorias ( )	Asistencia ( )
Trabajo de investigación ( )	Seminario ( )
Prácticas de taller o laboratorio ( )	Otras: ( )
Prácticas de campo ( )	
Otras: _____ ( )	