



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



Programa de actividad académica

Nombre de la asignatura: **Predicting Chemical Properties: Recapturing Chemical Concepts from Quantum Chemical Formalism**

Clave: No llenar este campo	Semestre: Fall 2024 2025-1	Campo de conocimiento: Química	No. Créditos:	
Carácter: Optativa de elección	Horas por semana		Total horas/ semana	Total horas/ semestre
Tipo: Teórico	Teoría:	Práctica:	3	48
	48	0		
Modalidad: CURSO	Duración del programa: semanas			

Actividad académica con seriación antecedente:

Objetivo general: Exposure to computing chemical properties including motivation, derivations of the methods, algorithms for the methods, and assessing reliability of the methods. A project and presentation will be required. This course will be taught in English.

Objetivos específicos: An overview of methods used for obtaining chemical properties not directly accessible from the solutions to the Schrödinger equation. The course serves as giving insight and intuition into chemistry from exactly soluble systems and how to compute properties. Primarily methods for predicting atomic and chemical properties will be considered in the context of conceptual DFT. Topics include a review of wave-function methods and DFT to obtain the electron density, derivation, and the Slater-Condon rules. There will be discussion on methods to extract atomic properties from the wave-function/density like that in QTAIM (Quantum Theory of Atoms in Molecules) and other schemes for computing atomic properties. Concepts arising in conceptual DFT and several descriptors that arise will be examined: The Fukui Function (generalized frontier molecular orbital theory), hardness, softness, ect.

Índice temático

Unidad	Tema	Horas	
		Teóricas	Prácticas
1	Introduction	3	
2	One Particle Systems and Intuition	6	
3	Many-Body Systems The Slater Determinant and Hartree-Fock	6	
4	Post-Hartree-Fock Methods	6	
5	The Electron Density and DFT	9	
6	QTAIM and other Atomic Properties Derivation/Algorithms	9	
7	Conceptual DFT-The Perturbative Perspective	3	
8	Presentations on Project Carried Out	3	
9			
10			
11			
12			
13			
Total de horas teóricas:		48	
Total de horas prácticas:			
Suma total de horas:		48	

Bibliografía básica actualizada:

- 1) Richard F. Bader: Atoms in Molecules (A Quantum Theory) Clarendon Press 1990
- 2) Attila Szabo, Neil S. Ostlund: Modern Quantum Chemistry (Introduction to Advanced Electronic Structure Theory) Courier Corporation 1996
- 3) Robert G. Parr, Weitao Yang: Density-Functional Theory of Atoms and Molecules, 1994
- 4) Pratim Kumar Chattaraj: Chemical Reactivity Theory (A Density Functional View) CRC Press, 2009

Bibliografía complementaria:

Sugerencias didácticas:		Mecanismos de evaluación del aprendizaje de los alumnos:	
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: _____	()		