



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



Programa de actividad académica

Nombre de la asignatura: Relativistic Quantum Chemistry

Clave:
No llenar este campo

Semestre:
Winter 2025
2026-1

Campo de conocimiento: Química

No. Créditos:

Carácter: Optativa de elección	Horas por semana	Total horas/ semana	Total horas/ semestre
Tipo: Teórico	Teoría: 48 Práctica: 0	3	48
Modalidad: CURSO	Duración del programa: semanas		

Actividad académica con seriación antecedente:

Objetivo general: Exposure to special relativity as it applies to quantum chemistry and within the atoms in molecules framework

Objetivos específicos: An overview of special relativity including the Dirac equation as well as the Dirac equation treatment of the one-electron atom. Commonly used methods in to find approximate solutions will be explored as well as QTAIM formulation within a relativistic framework

Índice temático

Unidad	Tema	Horas	
		Teóricas	Prácticas
1	Introduction, Classical Relativity	6	
2	Dirac Equation and its Interpretation	6	
3	One-electron Atoms	6	
4	Mean-Field Methods	6	
5	4-component methods	6	
6	2-component methods	6	
7	Applications	6	
8	Relativistic Quantum Theory of Atoms In Molecules	6	
9			
10			
11			
12			
13			
Total de horas teóricas:		48	
Total de horas prácticas:			
Suma total de horas:		48	

Bibliografía básica actualizada: Relativistic Quantum Chemistry, K. G. Dyall, Oxford University Press (2007)

Bibliografía complementaria: Relativistic Quantum Chemistry: The Fundamental Theory of Molecular Science 2nd Edition, Reiher M., Wolf A., Wiley-VCH (2015)

Sugerencias didácticas:

Exposición oral (X)
Exposición audiovisual ()
Ejercicios dentro de clase ()
Ejercicios fuera del aula (X)
Seminarios ()
Lecturas obligatorias ()
Trabajo de investigación ()
Prácticas de taller o laboratorio ()
Prácticas de campo ()
Otras: ()

Mecanismos de evaluación del aprendizaje de los alumnos:

Exámenes parciales (X)
Examen final escrito (X)
Trabajos y tareas fuera del aula (X)
Exposición de seminarios por los alumnos ()
Participación en clase ()
Asistencia ()
Seminario ()
Otras: ()