

<p><b>UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE CHIHUAHUA</b></p>  <p>UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE CHIHUAHUA</p> <p><b>UNIDAD ACADÉMICA:</b> FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS</p>  <p><b>PROGRAMA DEL CURSO:</b> QUÍMICA COMPUTACIONAL</p>	<b>DES:</b>	Ingeniería y Ciencias
	<b>Programa(s) académico(s)</b>	Lic. Químico, Lic. Ingeniero Químico
	<b>Tipo de Materia:</b> <i>Obligatoria / Optativa</i>	Obligatoria
	<b>Clave de la Materia:</b>	QUP712
	<b>Semestre:</b>	Séptimo
	<b>Área en plan de estudios (B,P,E,O):</b>	Específica
	<b>Total de horas por semana:</b>	4
	<b>h./semana trabajo presencial/virtual:</b>	2
	<b>h./semana laboratorio/taller:</b>	2
	<b>h./trabajo extra-clase:</b>	0
	<b>Total de horas por semestre:</b> <i>Total de horas semana por 16 semanas</i>	64
	<b>Créditos totales:</b>	4
	<b>Fecha de actualización:</b>	Febrero 2024
<b>Responsable(s) del diseño del programa del curso:</b>	Luz María Rodríguez Valdez Nora Aydee Sánchez Bojorge	
<b>Prerrequisito (s):</b>	QUE512	

#### DESCRIPCIÓN DE LA UNIDAD DE APRENDIZAJE/CURSO:

Analiza y explica los principios fundamentales de los métodos de cálculo químico-cuánticos, enfocándose en la selección de metodologías teóricas adecuadas y utilizando herramientas computacionales especializadas, para la determinación de propiedades moleculares, análisis de propiedades químicas complejas e interpretación de los resultados obtenidos de las simulaciones.

#### COMPETENCIA PRINCIPAL QUE DESARROLLA:

##### DB.1 CIENCIAS QUÍMICAS

Resuelve problemas básicos, teóricos y experimentales de las ciencias químicas fundamentales para la interpretación de la naturaleza química de la materia, con un enfoque socialmente responsable.

##### DB.3 HERRAMIENTAS MATEMÁTICAS

Resuelve problemas tanto abstractos como aplicados en las áreas de las ciencias químicas e ingenierías, aplicando las herramientas, el lenguaje o los métodos del modelado matemático.

**OTRAS COMPETENCIAS A LAS QUE SE CONTRIBUYE CON EL DESARROLLO DE LA UNIDAD DE APRENDIZAJE/CURSO:**

**B4: TRANSFORMACIÓN DIGITAL**

Transforma la cultura digital en la sociedad, en las organizaciones e instituciones educativas para aprovechar al máximo el potencial de las tecnologías y herramientas digitales, con responsabilidad y ética solidaria; propicia su uso responsable y ético que estimule la creatividad, innovación, la comunicación efectiva y el trabajo colaborativo y transdisciplinar en la solución de problemas de la sociedad digital; promoviendo la privacidad y la seguridad, así como el respeto a los derechos de autor y la propiedad intelectual.

**PI3. INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS E INGENIERÍA**

Aplica métodos de investigación para desarrollar estrategias que planteen soluciones a problemas complejos del campo profesional con recursos y herramientas de ciencias o ingeniería para el desarrollo sostenible de forma ética

**E1. SISTEMAS FISICOQUÍMICOS**

Aplica las leyes y fundamentos fisicoquímicos para explicar las reacciones químicas, procesos químicos, electroquímica, fenómenos de superficies, cinética química, química cuántica que permitan dar respuesta a problemáticas del entorno en las áreas donde hay transformaciones de la materia y energía.

<b>DOMINIOS</b> (Se toman de las competencias)	<b>OBJETOS DE ESTUDIO</b> (Contenidos necesarios para desarrollar cada uno de los dominios, temas y subtemas)	<b>RESULTADOS DE APRENDIZAJE</b> (Se plantean de los dominios y contenidos)	<b>METODOLOGÍA</b> (Estrategias, secuencias, recursos didácticos)	<b>EVIDENCIAS DE DESEMPEÑO</b> (Productos tangibles que permiten valorar los resultados de aprendizaje)
Dominios de competencias básicas-disciplinares  DB1.2. Utiliza reglas de nomenclatura química de diferentes grupos funcionales en estructuras químicas para comprender sus propiedades fisicoquímicas.	<b>Objeto de Estudio 1</b>  <b>Introducción a la Química Computacional (QC).</b>  1.1 Principios Fundamentales.  1.2 Ejemplos de la aplicación de QC a problemas actuales	Describe los conceptos y fundamentos básicos de la Química Computacional.  Identifica diferentes aplicaciones de cálculos químico-cuánticos en la predicción de propiedades físicas, químicas y estructurales de sistemas moleculares.	Búsqueda y análisis de información  Plataforma Moodle  Tareas individuales	Cuestionarios, plataforma Moodle y tareas individuales 20%  Exámenes escritos 70%  Exposición por el estudiante 10%

<p>Dominios de competencias profesionales y específicas</p> <p>E1.2 Integra con eficacia el lenguaje básico y los recursos matemáticos de la química cuántica, equilibrio de químico, cinética química, electroquímica, termodinámica, catálisis y fenómenos de superficies en la resolución de sistemas fisicoquímicos a diferentes escalas para su aplicación en el contexto profesional de la química. Esto con un sentido ético y acción sostenible con el medio ambiente.</p>	<p><b>Objeto de Estudio 2</b></p> <p><b>Métodos de Química Computacional</b></p> <p><b>2.1 Mecánica Molecular</b></p> <p>2.1.1 Teoría Básica. 2.1.2 Aplicación de los métodos de Mecánica Molecular.</p> <p><b>2.2 Métodos de Estructura Electrónica</b></p> <p>2.2.1 Semiempíricos. 2.2.1.1 <i>Definición de los métodos más conocidos.</i> 2.2.1.2 <i>Aplicaciones.</i></p> <p>2.2.2 Ab-initio. 2.2.2.1 <i>Método Hartree-Fock.</i> 2.2.2.2 <i>Aplicaciones.</i></p> <p>2.2.3 Teoría de Funcionales de la Densidad (DFT). 2.2.3.1 <i>Teoría Básica.</i> 2.2.3.2 <i>Funcionales tradicionales.</i> 2.2.3.3 <i>Aplicaciones.</i></p> <p><b>2.3 Conjuntos de base</b></p>	<p>Describe los conceptos y fundamentos básicos de la mecánica molecular, los métodos de estructura electrónica y los conjuntos de base.</p> <p>Selecciona la metodología de cálculo más adecuada para la determinación de propiedades moleculares.</p> <p>Aplica la metodología seleccionada para el estudio de propiedades en sistemas moleculares de interés.</p> <p>Analiza e interpreta los resultados obtenidos.</p>	<p>Exposiciones del profesor</p> <p>Búsqueda y análisis de información</p> <p>Plataforma Moodle</p> <p>Computadora</p>	<p>Cuestionarios, plataforma Moodle y tareas individuales 20%</p> <p>Elaboración de reportes de prácticas de laboratorio 70%</p> <p>Exposición por el estudiante 10%</p>
<p>Dominios de competencias básicas-disciplinares</p> <p>DB3.3. Utiliza herramientas estadísticas y software para el tratamiento, análisis y predicción de datos tanto teóricos como experimentales.</p> <p>B4.3 Aplica de forma ética diferentes herramientas digitales que</p>	<p><b>Objeto de Estudio 3</b></p> <p><b>Uso y manejo de programas de química computacional.</b></p> <p>3.1 Manejo de paquetes computacionales: Gaussian@03W, Caché, GaussView, Materials Studio 3.2 y HyperChem entre otros.</p>	<p>Desarrolla habilidades en el manejo de programas de simulación computacional, interpretando mediante los conocimientos adquiridos, los resultados obtenidos en el desarrollo de cálculos.</p>	<p>Exposiciones del profesor</p> <p>Búsqueda y análisis de información</p> <p>Plataforma Moodle</p> <p>Computadora</p>	<p>Cuestionarios, plataforma Moodle y tareas individuales 20%</p> <p>Elaboración de reportes de prácticas de laboratorio 70%</p>

favorezcan el trabajo colaborativo e interprofesional, considerando las principales innovaciones científicas y tecnológicas, relacionadas con la profesión.				Exposición de los resultados mediante la generación de un vídeo, podcast, tiktok o presentación virtual 10%
<p>Dominios de competencias básicas-disciplinares</p> <p>DB1.5. Interpreta la importancia del enlace químico y sus características en las propiedades físico-químicas de la materia.</p>	<p><b>Objeto de Estudio 4</b></p> <p><b>Cálculo de Propiedades Químicas.</b></p> <p>4.1 Estructura molecular. 4.2 Frecuencias Vibracionales. Espectros Infrarrojos IR 4.3 Propiedades electrónicas. 4.4 Afinidad Electrónica y potencial de Ionización. 4.5 Espectro ultravioleta</p>	<p>Determina las propiedades moleculares con la ayuda de los paquetes computacionales.</p> <p>Interpreta los resultados obtenidos, estableciendo comparaciones y elaborando conclusiones propias.</p>	<p>Exposiciones del profesor</p> <p>Búsqueda y análisis de información</p> <p>Plataforma Moodle</p> <p>Computadora</p>	<p>Cuestionarios, plataforma Moodle y tareas individuales 20%</p> <p>Elaboración de reportes de prácticas de laboratorio 70%</p> <p>Exposición de resultados 10%</p>
<p>Dominios de competencias básicas-disciplinares</p> <p>DB1.3. Comprende los aspectos cualitativos y cuantitativos que influyen en las reacciones químicas en diversos procesos.</p> <p>Dominios de competencias profesionales y específicas</p> <p>P3.2 Sintetiza y presenta</p>	<p><b>Objeto de Estudio 5</b></p> <p><b>Reactividad Química teórica.</b></p> <p><b>5.1 Reactividad Global.</b></p> <p>5.1.1 Electronegatividad 5.1.2 Blandura Química. 3.1.3 Dureza Química.</p> <p><b>5.2 Reactividad y Selectividad Locales.</b></p> <p>5.2.1 Índices de Fukui 5.2.2. Blandura Local</p>	<p>Determina las variables relacionadas con la reactividad química teórica global y local, así como su influencia en las reacciones químicas.</p>	<p>Exposiciones del profesor</p> <p>Proyectos</p> <p>Plataforma Moodle</p> <p>Computadora</p>	<p>Cuestionarios, plataforma Moodle y tareas individuales 20%</p> <p>Elaboración de reportes de prácticas de laboratorio 50%</p> <p>Exposición de resultados 10%</p> <p>Portafolios de</p>

resultados de investigaciones y experimentos de manera clara y concisa, al utilizar un lenguaje científico para el desarrollo de habilidades comunicativas con la aplicación de principios éticos y normas de la práctica profesional	5.2.3 Dureza Local			proyectos con enfoque en el desarrollo científico y tecnológico. 20%
---	--------------------	--	--	---

## LABORATORIO

<b>PRÁCTICA</b> (Nombre de la práctica)	<b>DOMINIO PROCEDIMENTAL</b>	<b>OBJETIVO DE LA PRÁCTICA</b>	<b>TIPO DE PRÁCTICA</b>	<b>EVIDENCIAS DE DESEMPEÑO</b> (Productos tangibles que permiten valorar los resultados de la práctica)
Práctica 1. Operaciones básicas en el programa gaussview.	Manejo de programas computacionales	Reconoce un número de operaciones básicas del programa de visualización GaussView, requeridas para la manipulación de un sistema molecular.	Tipo 2: Cerrada	Reporte de práctica
Práctica 2. Construcción de la matriz z.	Manejo de programas computacionales	Construye la matriz Z para definir la geometría de sistemas moleculares.	Tipo 3: Semiabierta o Semicerrada	Reporte de práctica
Práctica 3. Construcción de moléculas en programas de visualización.	Manejo de programas computacionales	Construye estructuras moleculares empleando la interface gráfica GaussView y utiliza herramientas para medir parámetros estructurales.	Tipo 3: Semiabierta o Semicerrada	Reporte de práctica
Práctica 4. Optimización de geometría con mecánica molecular.	Manejo de programas computacionales	Determina la geometría molecular de un sistema, empleando mecánica molecular.	Tipo 3: Semiabierta o Semicerrada	Reporte de práctica
Práctica 5. Optimización de geometría con métodos de estructura electrónica.	Manejo de programas computacionales	Determina la geometría molecular de un sistema, empleando métodos de estructura electrónica.	Tipo 3: Semiabierta o Semicerrada	Reporte de práctica

Práctica 6. Optimización de geometría con diferentes conjuntos de base.	Manejo de programas computacionales	Determina la geometría molecular de un sistema, empleando diferentes conjuntos de base.	Tipo 3: Semiabierta o Semicerrada	Reporte de práctica
Práctica 7. Cálculo de espectro infrarrojo.	Manejo de programas computacionales	Obtiene el espectro infrarrojo de un sistema molecular, a partir de un cálculo de frecuencias vibracionales	Tipo 3: Semiabierta o Semicerrada	Reporte de práctica
Práctica 8. Cálculo de energía y orbitales frontera.	Manejo de programas computacionales	Obtiene la energía electrónica total de una molécula, así como la localización de sus orbitales moleculares frontera.	Tipo 3: Semiabierta o Semicerrada	Reporte de práctica
Práctica 9. Cálculo de parámetros de reactividad química.	Manejo de programas computacionales	Calcula los parámetros de reactividad química globales y locales, en un sistema molecular.	Tipo 3: Semiabierta o Semicerrada	Reporte de práctica
Práctica 10. Cálculo de espectros de absorción.	Manejo de programas computacionales	Obtiene el espectro de absorción de un sistema molecular, a partir del cálculo de propiedades de estado excitado.	Tipo 3: Semiabierta o Semicerrada	Reporte de práctica

FUENTES DE INFORMACIÓN (Bibliografía, direcciones electrónicas)	EVALUACIÓN DE LOS APRENDIZAJES (Criterios, ponderación e instrumentos)
<p>Cuevas, G., &amp; Cortés, F. (2003). <i>Introducción a la química computacional</i>. Fondo de cultura económica.</p> <p>Andrés, J., &amp; Beltrán, J. (2013). <i>Química teórica y computacional</i>. Universitat Jaume I. Servei de Comunicació i Publicacions.</p> <p>Young, D. (2004). <i>Computational chemistry: a practical guide for applying techniques to real world problems</i>. John Wiley &amp; Sons.</p> <p>Pearson, R. G. (1997). <i>Chemical hardness</i> (Vol. 10, No. 3527606173). Weinheim: Wiley-VCH.</p> <p>Chattaraj, P. K. (Ed.). (2009). <i>Chemical reactivity theory: a density functional view</i>. CRC press.</p> <p>Los libros que se encuentran en biblioteca son suficientes para el desarrollo de las actividades, por lo que, no es necesaria la adquisición de bibliografía más reciente.</p>	<p><b>Continúa 25%:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Cuestionarios resueltos.</li> <li>• Reportes de laboratorio.</li> <li>• Actividades de plataforma Moodle</li> </ul> <p><b>Reconocimientos parciales 25%:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Evaluación Escrita.</li> </ul> <p><b>Reconocimiento final 50%:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Portafolio de proyectos con enfoque en el desarrollo científico</li> <li>• Presentación de un proyecto sencillo de investigación científica. Donde se estudie un sistema molecular orgánico y en el cual se apliquen cada uno de los cálculos abordados durante el desarrollo del curso.</li> </ul>

## CRONOGRAMA DEL AVANCE PROGRAMÁTICO

Objetos de Estudio	Semanas															
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
OBJETO DE ESTUDIO 1																
OBJETO DE ESTUDIO 2																
OBJETO DE ESTUDIO 3																
OBJETO DE ESTUDIO 4																
OBJETO DE ESTUDIO 5																