


<p style="text-align: center;">UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE CHIHUAHUA</p>  <p style="text-align: center;">UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE CHIHUAHUA</p> <p style="text-align: center;">UNIDAD ACADÉMICA: FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS</p> <p style="text-align: center;">PROGRAMA DEL CURSO: QUÍMICA COMPUTACIONAL</p>	DES:	INGENIERÍA Y CIENCIAS
	Programa(s) académico(s)	Q, QBP, IQ
	Tipo de Materia: <i>Obligatoria / Optativa</i>	Optativa
	Clave de la Materia:	QU713
	Semestre:	Octavo
	Área en plan de estudios (B,P,E, O):	P
	Total de horas por semana:	4
	Laboratorio o Taller:	4
	h./semana trabajo presencial/virtual	2
	h./semana laboratorio/taller	2
	h. trabajo extra-clase:	0
	Total de horas por semestre: <i>Total de horas semana por 16 semanas</i>	64
	Créditos totales:	4
	Fecha de actualización:	Enero 2016
Prerrequisito (s):	100 créditos	

DESCRIPCIÓN DE LA UNIDAD DE APRENDIZAJE/ CURSO:

Presentar los diversos métodos teóricos para estudiar las propiedades y reactividad química molecular mediante el uso de paquetes comerciales.
Conocer y comprender cómo los métodos teóricos pueden apoyar el trabajo experimental

COMPETENCIA PRINCIPAL QUE SE DESARROLLA:

AE1: Atributo de Egreso 1. Identificar, formular y resolver problemas complejos de ingeniería aplicando los principios de las ciencias básicas e ingeniería

CD1. El alumno identifica las variables y parámetros involucrados en los problemas a resolver. **CD4.** El alumno integra conocimientos de ciencias básicas y de ingeniería para formular y resolver problemas mediante la interpretación de modelos.

AE3: Desarrollar y conducir una experimentación adecuada; analizar e interpretar datos y utilizar el juicio ingenieril para establecer conclusiones.

DOMINIOS (Se toman de las competencias)	OBJETOS DE ESTUDIO (Contenidos necesarios para desarrollar cada uno de los dominios)	RESULTADOS DE APRENDIZAJE (Se plantean de los dominios y contenidos)	METODOLOGÍA (Estrategias, secuencias, recursos didácticos)	EVIDENCIAS (Productos tangibles que permiten valorar los resultados de aprendizaje)
<p>E3. SÍNTESIS Y FORMULACIÓN</p> <p>Diseña y/o modifica métodos y operaciones encaminados a la elaboración, purificación, formulación y caracterización de sustancias y productos.</p> <p>P6 INVESTIGACIÓN</p> <p>Investiga, selecciona y estructura estrategias que permitan resolver problemas específicos del campo profesional del químico</p> <p>B3 COMUNICACIÓN</p> <p>Utiliza diversos lenguajes y fuentes de información para comunicarse efectivamente.</p>	<p>1. TEORÍA DE ORBITALES MOLECULARES</p> <p>1.1 Función de onda. 1.2 Operador Hamiltoniano. 1.2.1 Principio variacional. 1.2.2 Aproximación Born-Oppenheimer. 1.3 Combinación lineal de orbitales atómicos CLOA. 1.4 Función de onda de muchos electrones.</p> <p>2. FUNCIONES DE BASE</p> <p>2.1 Tipos de funciones de base. 2.2 Bases polarizadas y difusas.</p>	<p>E3</p> <ul style="list-style-type: none"> - Aplica la teoría, el modelado molecular y la simulación computacional para la selección de los componentes adecuados en el desarrollo de nuevos compuestos. - Utiliza los métodos de química computacional y teórica para la interpretación de resultados experimentales. <p>P6</p> <ul style="list-style-type: none"> - Aplica el método científico. - Selecciona y califica información. <p>B3</p> <ul style="list-style-type: none"> - Desarrolla su capacidad de comunicación verbal y escrita de forma efectiva. - Habilidades de lectura e interpretación de textos. - Demuestra dominio básico en el manejo de recursos documentales y electrónicos. - Recopila, analiza y aplica información de diversas fuentes. 	<p>Autoaprendizaje (resolución de cuestionarios):</p> <ul style="list-style-type: none"> - Estudio Individual - Tareas Individuales - Búsqueda y análisis de información 	<p>Cuestionario resuelto de forma individual en cuaderno.</p>

		<ul style="list-style-type: none"> - Maneja y aplica paquetes computacionales para desarrollar documentos y presentaciones. - Utiliza creativamente la información para atender problemas o tareas específicas. - Localiza fuentes de información de calidad, aplica principios para la organización de dicha información. 		
	<p>3. MECÁNICA MOLECULAR</p> <p>3.1 Ecuación de energía potencial.</p> <p>3.1.1 Términos de energía potencial.</p> <p>3.2 Campos de Fuerza.</p> <p>3.3 Ventajas y desventajas.</p> <p>3.4 Aplicación de los métodos de Mecánica Molecular.</p>	<p>E3</p> <ul style="list-style-type: none"> - Aplica la teoría, el modelado molecular y la simulación computacional para la selección de los componentes adecuados en el desarrollo de nuevos compuestos. - Utiliza los métodos de química computacional y teórica para la interpretación de resultados experimentales. <p>P6</p> <ul style="list-style-type: none"> - Aplica el método científico. - Selecciona y califica información. <p>B3</p> <ul style="list-style-type: none"> - Desarrolla su capacidad de 	<p>Autoaprendizaje (desarrollo de cálculos):</p> <ul style="list-style-type: none"> - Tareas Individuales - Desarrollo de cálculos teóricos <p>Aprendizaje colaborativo (elaboración de proyecto):</p> <ul style="list-style-type: none"> - Análisis y discusión de grupos - Tareas en equipo 	<p>Presentación de reportes incluyendo los resultados obtenidos de la simulación computacional del sistema molecular seleccionado.</p> <p>Elaboración de un proyecto para la escritura de un artículo científico incluyendo los resultados obtenidos.</p>

	<p>comunicación verbal y escrita de forma efectiva.</p> <ul style="list-style-type: none"> - Habilidades de lectura e interpretación de textos. - Demuestra dominio básico en el manejo de recursos documentales y electrónicos. - Recopila, analiza y aplica información de diversas fuentes. - Maneja y aplica paquetes computacionales para desarrollar documentos y presentaciones. - Utiliza creativamente la información para atender problemas o tareas específicas. - Localiza fuentes de información de calidad, aplica principios para la organización de dicha información. 		
<p>4. MÉTODOS SEMIEMPÍRICOS.</p> <p>4.1 Introducción.</p> <p>4.2 Método de Hückel y Hückel extendido.</p> <p>4.3 Métodos MINDO, AM1, PM3, PM5 y PM6.</p> <p>4.4 Ventajas y desventajas.</p>	<p>E3</p> <ul style="list-style-type: none"> - Aplica la teoría, el modelado molecular y la simulación computacional para la selección de los componentes adecuados en el desarrollo de nuevos compuestos. - Utiliza los métodos de química 	<p>Autoaprendizaje (resolución de cuestionarios):</p> <ul style="list-style-type: none"> - Estudio Individual - Tareas Individuales - Búsqueda y análisis de información 	<p>Cuestionario resuelto de forma individual en cuaderno.</p> <p>Presentación de reportes incluyendo los resultados obtenidos de la simulación computacional empleando</p>

<p>4.5 Aplicaciones y comparaciones entre métodos.</p>	<p>computacional y teórica para la interpretación de resultados experimentales.</p> <p>P6</p> <ul style="list-style-type: none"> - Aplica el método científico. - Selecciona y califica información. <p>B3</p> <ul style="list-style-type: none"> - Desarrolla su capacidad de comunicación verbal y escrita de forma efectiva. - Habilidades de lectura e interpretación de textos. - Demuestra dominio básico en el manejo de recursos documentales y electrónicos. - Recopila, analiza y aplica información de diversas fuentes. - Maneja y aplica paquetes computacionales para desarrollar documentos y presentaciones. - Utiliza creativamente la información para atender problemas o tareas específicas. - Localiza fuentes de información de calidad, aplica principios para la organización de dicha información. 	<p>Autoaprendizaje (desarrollo de cálculos):</p> <ul style="list-style-type: none"> - Tareas Individuales <p>Aprendizaje colaborativo (elaboración de proyecto):</p> <ul style="list-style-type: none"> - Análisis y discusión de grupos - Tareas en equipo 	<p>diferentes métodos semiempíricos.</p> <p>Elaboración de un proyecto para la escritura de un artículo científico incluyendo los resultados obtenidos.</p>
--	--	--	---

<p>5 .AB-INITIO.</p> <p>5.1 Introducción.</p> <p>5.2 Teoría Hartree-Fock.</p> <p>5.3 Correlación electrónica.</p> <p>5.4 Ventajas y desventajas.</p> <p>5.5 Aplicaciones y comparación entre métodos.</p>	<p>E3</p> <ul style="list-style-type: none"> - Aplica la teoría, el modelado molecular y la simulación computacional para la selección de los componentes adecuados en el desarrollo de nuevos compuestos. - Utiliza los métodos de química computacional y teórica para la interpretación de resultados experimentales. <p>P6</p> <ul style="list-style-type: none"> - Aplica el método científico. - Selecciona y califica información. <p>B3</p> <ul style="list-style-type: none"> - Desarrolla su capacidad de comunicación verbal y escrita de forma efectiva. - Habilidades de lectura e interpretación de textos. - Demuestra dominio básico en el manejo de recursos documentales y electrónicos. - Recopila, analiza y aplica información de diversas fuentes. - Maneja y aplica paquetes computacionales para desarrollar 	<p>Autoaprendizaje (resolución de cuestionarios):</p> <ul style="list-style-type: none"> - Estudio Individual - Tareas Individuales - Búsqueda y análisis de información <p>Autoaprendizaje (desarrollo de cálculos):</p> <ul style="list-style-type: none"> - Tareas Individuales - Desarrollo de cálculos teóricos <p>Aprendizaje colaborativo (elaboración de proyecto):</p> <ul style="list-style-type: none"> - Análisis y discusión de grupos - Tareas en equipo 	<p>Cuestionario resuelto de forma individual en cuaderno.</p> <p>Presentación de reportes incluyendo los resultados obtenidos de la simulación computacional empleando el método Hartree-Fock</p> <p>Elaboración de un proyecto para la escritura de un artículo científico incluyendo los resultados obtenidos.</p>

	<p>documentos y presentaciones.</p> <ul style="list-style-type: none"> - Utiliza creativamente la información para atender problemas o tareas específicas. - Localiza fuentes de información de calidad, aplica principios para la organización de dicha información. 		
<p>6. TEORÍA DE FUNCIONALES DE LA DENSIDAD (DFT).</p> <p>6.1 Introducción.</p> <p>6.2 Teoremas de Hohenber-Kohn.</p> <p>6.3 Ecuaciones de Kohn-Sham.</p> <p>6.4 Funcionales de intercambio y correlación.</p> <p>6.4.1 Aproximación local de la densidad.</p> <p>6.4.2 Aproximación de gradiente generalizado.</p> <p>6.5 Tipos de Funcionales.</p> <p>6.9 Ventajas y desventajas.</p> <p>6.10 Aplicación y comparación entre funcionales</p>	<p>E3</p> <ul style="list-style-type: none"> - Aplica la teoría, el modelado molecular y la simulación computacional para la selección de los componentes adecuados en el desarrollo de nuevos compuestos. - Utiliza los métodos de química computacional y teórica para la interpretación de resultados experimentales. <p>P6</p> <ul style="list-style-type: none"> - Aplica el método científico. - Selecciona y califica información. <p>B3</p> <ul style="list-style-type: none"> - Desarrolla su capacidad de comunicación verbal y escrita de forma efectiva. 	<p>Autoaprendizaje (resolución de cuestionarios):</p> <ul style="list-style-type: none"> - Estudio Individual - Tareas Individuales - Búsqueda y análisis de información <p>Autoaprendizaje (desarrollo de cálculos):</p> <ul style="list-style-type: none"> - Tareas Individuales - Desarrollo de cálculos teóricos <p>Aprendizaje colaborativo (elaboración de proyecto):</p> <ul style="list-style-type: none"> - Análisis y discusión de grupos 	<p>Cuestionario resuelto de forma individual en cuaderno.</p> <p>Presentación de reportes incluyendo los resultados obtenidos de la simulación computacional empleando diferentes funcionales en el cálculo de propiedades teóricas.</p> <p>Elaboración de un proyecto para la escritura de un artículo científico incluyendo los resultados obtenidos.</p>

	<ul style="list-style-type: none"> - Habilidades de lectura e interpretación de textos. - Demuestra dominio básico en el manejo de recursos documentales y electrónicos. - Recopila, analiza y aplica información de diversas fuentes. - Maneja y aplica paquetes computacionales para desarrollar documentos y presentaciones. - Utiliza creativamente la información para atender problemas o tareas específicas. - Localiza fuentes de información de calidad, aplica principios para la organización de dicha información. 	- Tareas en equipo	
<p>7. CÁLCULO DE PROPIEDADES QUÍMICAS.</p> <p>7.1 Optimización de la geometría molecular.</p> <p>7.1.1 Superficie de energía potencial.</p> <p>7.2 Frecuencias Vibracionales.</p> <p>7.1.2 Espectros Infrarrojos (IR).</p> <p>7.3 Propiedades electrónicas.</p>	<p>E3</p> <ul style="list-style-type: none"> - Aplica la teoría, el modelado molecular y la simulación computacional para la selección de los componentes adecuados en el desarrollo de nuevos compuestos. - Utiliza los métodos de química computacional y teórica para la interpretación de 	<p>Autoaprendizaje (resolución de cuestionarios y desarrollo de cálculos):</p> <ul style="list-style-type: none"> - Estudio Individual - Tareas Individuales - Búsqueda y análisis de información 	<p>Presentación de reportes incluyendo los resultados obtenidos de la simulación computacional en cálculos de las propiedades químicas de interés.</p>

<p>7.4 Reactividad Química global y local.</p> <p>7.5 Propiedades de estado basal.</p> <p>7.6 Propiedades de estado excitado..</p>	<p>resultados experimentales.</p> <p>P6</p> <ul style="list-style-type: none"> - Aplica el método científico. - Selecciona y califica información. <p>B3</p> <ul style="list-style-type: none"> - Desarrolla su capacidad de comunicación verbal y escrita de forma efectiva. - Habilidades de lectura e interpretación de textos. - Demuestra dominio básico en el manejo de recursos documentales y electrónicos. - Recopila, analiza y aplica información de diversas fuentes. - Maneja y aplica paquetes computacionales para desarrollar documentos y presentaciones. - Utiliza creativamente la información para atender problemas o tareas específicas. - Localiza fuentes de información de calidad, aplica principios para la organización de dicha información. 	<p>- Desarrollo de cálculos teóricos</p>	
--	--	--	--

FUENTES DE INFORMACIÓN (Bibliografía, direcciones electrónicas)	EVALUACIÓN DE LOS APRENDIZAJES (Criterios, ponderación e instrumentos)
<p>Andrés J., Beltrán J. <i>Química Teórica y Computacional</i>. Publicacions de la Universitat Jaume I. Castelló de la Plana. (2000).</p> <p>Young D. <i>Computational Chemistry. A Practical Guide for Applying Techniques to Real world problems</i>. Wiley – Interscience. Ed. John Wiley & Sons. (2001).</p> <p>Bertran J., Branchadell V., Moreno M. and Sodupe M. <i>Química Cuántica. Fundamentos y Aplicaciones Computacionales</i>. Ed. Síntesis. (2000).</p> <p>Foresman James B., Frisch AEleen. 1996. <i>Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods</i>. Segunda Edición. Gaussian Inc. Pittsburg PA.</p> <p>Pearson, R. G. <i>Chemical Hardness</i>. Ed. John Wiley & Sons (1997).</p> <p>Jensen F. <i>Introduction to Computational Chemistry</i>. Ed. John Wiley & Sons (1999).</p> <p>Cramer Christopher J. <i>Essentials of Computational Chemistry. Theories and Models</i>. Segunda Edición. Ed. John Wiley & Sons, Ltd. (2004).</p> <p>Física del Estado Sólido: Teoría y Métodos Numéricos, Francisco Dominguez-Adame, Ediciones Paraninfo. (2000).</p> <p>Molecular Dynamics Simulation: Elementary Methods, J. M. Haile, Wiley (1997).</p> <ul style="list-style-type: none"> • Methods for the numerical solution of partial differential equations, Dale U. Von Rosenberg, Publishing division (1977). 	<p>Continua:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Participación diaria. - Resolución de problemas numéricos - Presentación de reportes. - Investigación diaria. - Realización de tareas asignadas. <p>Reconocimientos parciales:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Evaluación Escrita. - Actividades integradoras y de aplicación de conocimientos. <p>Reconocimiento final:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Presentación de un artículo de investigación presentando los resultados obtenidos de la simulación computacional del sistema molecular seleccionado. <p>Criterios de evaluación:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Sistemas moleculares de interés. 2. Justificación acerca de la importancia y relevancia del sistema molecular seleccionado. 3. Fundamentos teóricos.

4. Aplicación de los conocimientos adquiridos durante el curso de Química Teórica y Computacional
5. Determinación teórica de la mayor cantidad posible de propiedades moleculares.
6. Discusión de resultados.
7. Conclusión
8. Aporte científico.

CRONOGRAMA DEL AVANCE PROGRAMÁTICA

Objetos de aprendizaje	Semanas															
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
O. E. I ORBITALES MOLECULARES	X															
O. E. II FUNCIONES BASE		X	X													
O. E. III MECÁNICA MOLECULAR				X	X											
O. E. IV SEMIEMPÍRICOS						X	X	X								
O. E. V <i>Ab-initio</i>									X	X	X					
O. E. VI DFT												X	X	X		
O. E. VII PROPIEDADES QUÍMICAS															X	X