


<p style="text-align: center;"><b>UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE CHIHUAHUA</b></p>  <p style="text-align: center;">UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE CHIHUAHUA</p> <p style="text-align: center;"><b>UNIDAD ACADÉMICA:</b> Facultad de Ciencias Químicas</p> <p style="text-align: center;"><b>PROGRAMA DEL CURSO:</b> Dinámica molecular</p>	<b>DES:</b>	<b>INGENIERÍA Y CIENCIAS</b>
	<b>Programa(s) académico(s)</b>	Químico
	<b>Tipo de Materia:</b> <i>Obligatoria / Optativa</i>	Optativa
	<b>Clave de la Materia:</b>	EQ901
	<b>Semestre:</b>	8, 9
	<b>Área en plan de estudios (B,P,E, O):</b>	E
	<b>Total de horas por semana:</b>	7
	<b>Laboratorio o Taller:</b>	Laboratorio
	h./semana trabajo presencial/virtual	2
	h./semana laboratorio/taller	5
	h. trabajo extra-clase:	-
	<b>Total de horas por semestre:</b> <i>Total de horas semana por 16 semanas</i>	
	<b>Créditos totales:</b>	7
	<b>Fecha de actualización:</b>	Enero 2023
<b>Prerrequisito (s):</b>	180 créditos	

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

*Presentar las distintas técnicas de Dinámica Molecular como una herramienta de la Química para estudiar sistemas de muchos cuerpos a nivel microscópico. Seleccionar el método y el paquete más apropiado para estudiar distintos sistemas químicos, físicos y biológicos. Realizar cálculos de propiedades empleando programas de Dinámica Molecular. Interpretar los resultados obtenidos de una simulación de Dinámica Molecular.*

**COMPETENCIA PRINCIPAL QUE SE DESARROLLA:**

*E2 INOVACIÓN CIENTIFICO- TECNOLÓGICAS*

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

*B2 SOLUCIÓN DE PROBLEMAS.  
B3 COMUNICACIÓN  
B4 EMPRENDEDOR  
B5 TRABAJO EN EQUIPO Y LIDERAZGO  
P6 INVESTIGACIÓN.*

<b>DOMINIOS</b> (Se toman de las competencias)	<b>OBJETOS DE ESTUDIO</b> (Contenidos, temas y subtemas)	<b>RESULTADOS DE APRENDIZAJE</b>	<b>METODOLOGÍA</b> (Estrategias, secuencias, recursos didácticos)	<b>EVIDENCIAS DE DESEMPEÑO</b>
---	---	----------------------------------	--	--------------------------------

<p>Define la hipótesis de estudio con base en el método científico para resolución de problemas de índole química.</p> <p>Selecciona el procedimiento adecuado para solucionar el problema con base en la hipótesis de trabajo.</p> <p>Muestra ética profesional en la colección y el manejo de sus datos en bitácora.</p>	<p>1. Introducción.</p> <p>1.1. Sistemas de muchos cuerpos.</p> <p>1.2. Un breve reseña histórica de la simulación computacional.</p> <p>1.3. ¿Qué puede estudiarse con DM?</p> <p>1.4. Ecuaciones del movimiento para sistemas atómicos.</p> <p>1.4.1. Métodos en diferencias finitas.</p> <p>1.4.2. Métodos de integración de las ecuaciones del movimiento.</p> <p>1.5. Ensamblajes estadísticos.</p> <p>1.6. Software de DM</p>	<p>1. Identifica los sistemas en las ciencias químicas que pueden ser estudiados mediante métodos de dinámica molecular.</p> <p>2. Conoce el fundamento teórico de los distintos métodos de DM.</p> <p>3. Selecciona el ensamble estadístico más apropiado para estudiar un sistema.</p> <p>4. Conoce los paquetes de DM más empleados en la actualidad y las ventajas de cada uno de ellos.</p>	<p>Resolución de ejercicios y casos prácticos.</p>	<p>Bitácora y cuaderno de ejercicios</p>
<p>Interpreta la información generada a partir de la investigación científica con base en teorías y modelos químicos propuestos</p>	<p>2. Dinámica molecular básica</p> <p>2.1. Potenciales de interacción</p> <p>2.2. Configuraciones y velocidades iniciales.</p> <p>2.3. Equilibración del sistema.</p> <p>2.4. Organización de las simulaciones.</p> <p>2.5. Simulación de nanopartículas metálicas usando LAMMPS</p>	<p>1. Conoce los principales componentes de la simulación de dinámica molecular</p> <p>2. Selecciona los parámetros adecuados para la simulación</p>	<p>Participación en seminarios y asesorías.</p>	<p>Registro de participación.</p> <p>Rúbrica de evaluación.</p>
<p>Compara resultados y crea conocimiento para la adecuada toma de decisiones de un determinado campo de trabajo.</p>	<p>3. Dinámica molecular de sistemas biológicos</p> <p>3.1. Campos de fuerzas</p> <p>3.2. Configuración Inicial: Docking Molecular</p> <p>3.3. Parametrización de moléculas</p> <p>3.4. Preparación del sistema utilizando CHARMM-GUI y VMD</p> <p>3.6. Simulación de la interacción proteína-ligando utilizando NAMD</p>	<p>1. Conoce los distintos campos de fuerzas parametrizados para la simulación de sistemas biológicos.</p> <p>2. Desarrolla un protocolo adecuado para la simulación de sistemas con varios componentes.</p>	<p>Realización de trabajo computacional.</p> <p>Elaboración y presentación de informes.</p>	<p>Informes, revisados tras la lista de cotejo.</p> <p>Presentación de los archivos generados en las herramientas computacionales.</p>
<p>Concluye con base al análisis de resultados y los objetivos propuestos.</p>	<p>4. Dinámica molecular ab initio: Una introducción</p> <p>4.1. El Hamiltoniano del sistema</p>	<p>1. Identifica sistemas que requieren de la simulación utilizando los principios de la mecánica cuántica.</p>	<p>Elaboración y exposición pública de un trabajo individual.</p>	<p>Presentación digital en herramientas de exposición.</p>

	4.2. Aproximación de Born-Oppenheimer 4.3. Caso ejemplo utilizando SIESTA 4.3 Caso ejemplo utilizando DFTB+	2. Simula sistemas sencillos a nivel cuántico.		
--	---	--	--	--

FUENTES DE INFORMACIÓN (Bibliografía, direcciones electrónicas)	EVALUACIÓN DE LOS APRENDIZAJES (Criterios, ponderación e instrumentos)
<p><i>D. C. Rapaport, The Art of Molecular Dynamics Simulation, Cambridge University Press; 2nd Edition (2004).</i></p> <p><i>Daan Frenkel, Berend Smit; Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications, Elsevier Science &amp; Technology Books (2003).</i></p> <p><i>J. M. Haile, Molecular Dynamics Simulation: Elementary Methods, Wiley-Interscience, 1st Edition (1997).</i></p> <p><i>M. P. Allen, Computer Simulation of Liquids, Oxford Science Publications, Reprint Edition (1989).</i></p>	<p>Se realizará una evaluación continua formativa y de aprendizaje valorando los progresos del alumno a partir de:</p> <p>a) Resolución de ejercicios y casos prácticos. b) Participación en seminarios y asesorías. c) Realización de trabajo computacional. d) Elaboración y presentación de informes. e) Elaboración y exposición pública de un trabajo individual.</p> <p>Evaluación continua: 70% de la calificación total. En ella se valorará la participación activa del alumno, las respuestas dadas a los supuestos teórico-prácticos propuestos, el desarrollo de trabajo computacional y, en su caso, la realización y presentación de informes.</p> <p>Realización y presentación de un trabajo final: 30% de la calificación total. Cada alumno deberá elaborar un trabajo escrito sobre uno de los temas propuestos por el profesor, que deberá exponer en público.</p>

## CRONOGRAMA DEL AVANCE PROGRAMÁTICA

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