

CARTA DESCRIPTIVA (FORMATO MODELO EDUCATIVO UACJ VISIÓN 2020)

I. Identificadores de la asignatura		
Instituto: Instituto de Ciencias Biomédicas	Modalidad:	Presencial
Departamento: Ciencias Químico- Biológicas		
Materia: Química computacional	Carácter: Obligatoria	
Programa: Química	Tipo: Curso	
Clave: BAS314608		
Nivel: Principiante		
Horas: 60	Teoría: 60	Práctica: 0

II. Ubicación	
Antecedentes: Ninguno	Clave
Consecuente: Ninguna	

III. Antecedentes
Conocimientos: Química general, estequiometría, manejo y despeje de fórmulas matemáticas, nociones de reacciones químicas orgánicas e inorgánicas, fundamentos de termodinámica, teoría de los gases, movimientos moleculares, elementos de cálculo y ecuaciones, nociones de mecánica cuántica, fundamentos de computación e informática.
Habilidades: Capacidad de análisis y resolución de problemas matemáticos y de química teórica, creatividad para proponer soluciones a problemas concretos, manejo de cuestiones interdisciplinarias complejas.

Actitudes y valores: Sentido de la responsabilidad, actitud abierta y tolerante hacia sus compañeros de clase y su maestro, disposición al debate y a la participación en las diferentes actividades del curso.

IV. Propósitos Generales

Los propósitos fundamentales del curso son:

- Proporcionar información e incentivar la discusión y el análisis sobre las aplicaciones de las ciencias computacionales a la química desde un enfoque integrador.
- Proporcionar mejores herramientas de análisis a los estudiantes de la licenciatura en química para facilitar la toma de decisiones en cuestiones de química teórico-práctica, ya sea en aplicaciones industriales, académicas o de investigación.

V. Compromisos formativos

Conocimientos: Herramientas de análisis de problemas en las diversas disciplinas derivadas de la química mediante el uso del potencial informático desde un enfoque multidimensional y multidisciplinario.

Habilidades: Que el estudiante aprenda a discriminar y resolver situaciones creativamente donde se involucren conocimientos relativos a las diversas áreas de estudio de la química computacional.

Actitudes y valores: Actitud crítica hacia la información generada por los sistemas de química computacional, replanteamiento del papel de la innovación y la creatividad en el estudio de la química y áreas relacionadas.

VI. Condiciones de operación

Espacio:
Laboratorio de
química
computacional
(centro de

cómputo),
aula de clases

Laboratorio:

Centro de
cómputo

Mobiliario:

Propio de un
laboratorio de
computación.

Población: Deseable: 10
Máxima: 35

Material de uso frecuente: Proyector de imágenes, computadoras portátiles o de escritorio, artículos y libros sobre el tema.

Condiciones especiales: Posible asistencia a conferencias y seminarios sobre química computacional y teórica.

VII. Contenidos y tiempos estimados

Temas	Contenidos	Actividades
1. Introducción a la informática (10 hrs)	1.1. Introducción a las herramientas informáticas (10 hrs)	<p>1.1.1. Charla, análisis y discusión grupal acerca de los lenguajes de computadora, la evolución de los sistemas operativos, herramientas de la era de la internet (navegadores, buscadores, redes sociales, programas P2P) (3 hrs)</p> <p>1.1.2. Charla, análisis y discusión grupal acerca de la filosofía del software libre, software privativo, de código abierto, proyectos GNU/Linux (distribuciones con kernel Linux como Ubuntu, Fedora, Debian, Red Hat, Gentoo, Mandriva, etc.) y otros sistemas operativos libres (Android, Google Chrome OS, etc.) (4 hrs)</p> <p>1.1.3. Charla, análisis y discusión grupal acerca de la evolución de las computadoras y los medios de almacenamiento de información hasta la actualidad (de los primeros ordenadores hasta las supercomputadoras de la actualidad y el uso de servidores para eficientar el tiempo de cómputo), lectura y elaboración individual de un ensayo del artículo "Cramming more components onto</p>

		integrated circuits” de Gordon E. Moore (3 hrs)
2. Introducción a la química computacional (14 hrs)	2.1. Quehacer de la química computacional (14 hrs)	<p>2.1.1. Charla, análisis y discusión como introducción al modelaje, a la simulación computacional y las principales características de los modelos moleculares (4 hrs)</p> <p>2.1.2. Investigación bibliográfica y elaboración individual de un ensayo acerca de las principales aplicaciones de la química computacional, de los parámetros de medición de la misma y de los requerimientos técnicos para una correcta modelación molecular (4 hrs)</p> <p>2.1.3. Investigación bibliográfica y elaboración individual de un ensayo acerca de los principales paquetes computacionales (de software libre y privativo) utilizados en la química computacional. Discusión grupal de los resultados (2 hrs)</p> <p>2.1.4. Ejercicio: Creación de una cuenta y manejo de la interfase gráfica WebMO y su conexión a servidores computacionales. Examen rápido de retroalimentación mediante la plataforma Aula Virtual UACJ (4 hrs)</p>
3. Mecánica molecular (8 hrs)	3.1. Características y aplicaciones de la mecánica molecular a la química (8 hrs)	3.1.1. Charla, discusión grupal, análisis y elaboración de un ensayo acerca de las aplicaciones, principales parámetros, ventajas/desventajas y ecuaciones utilizadas por la mecánica molecular para el cálculo de estructuras moleculares. Examen rápido de retroalimentación mediante la plataforma Aula Virtual UACJ (4 hrs)

		3.1.2. Ejercicio: Determinación de ángulos y longitudes de enlace, fuerzas de van der Waals, rotaciones de enlaces sencillos e interacciones electrostáticas de moléculas simples mediante el uso de WebMO y el software Tinker (4 hrs)
4. Mecánica cuántica (28 hrs)	<p>4.1. Características y aplicaciones de la mecánica cuántica a la química (2 hrs)</p> <p>4.2. Aproximaciones matemáticas utilizadas por la mecánica cuántica en sus aplicaciones a la química computacional (2 hrs)</p> <p>4.3. Métodos <i>Ab Initio</i> y funciones de base principales (10 hrs)</p>	<p>4.1.1. Charla, discusión grupal, análisis y elaboración de un ensayo acerca de las aplicaciones, principales parámetros y ventajas/desventajas de la mecánica cuántica para la resolución de la ecuación de Schrödinger (2 hrs)</p> <p>4.2.1. Charla, discusión grupal, análisis y elaboración de un ensayo acerca de las aproximaciones matemáticas de la mecánica cuántica (Born-Oppenheimer, Hartree-Fock, LCAO) y su optimización para aplicaciones químicas. Examen rápido de retroalimentación mediante la plataforma Aula Virtual UACJ (2 hrs)</p> <p>4.3.1. Charla, análisis, discusión grupal y elaboración de un ensayo individual acerca de los principales métodos <i>Ab Initio</i> (Hartree-Fock y post Hartree-Fock), los modelos de estructura electrónica y enlace químico (teoría de los orbitales moleculares y el modelo RPECV) y las funciones de base para su corrección (GTO's y STO's). Examen rápido de retroalimentación mediante la plataforma Aula Virtual UACJ (6 hrs)</p> <p>4.3.2. Ejercicio: Cálculo de funciones de base (modelado de un átomo de hidrogeno y cálculo del LCAO) (4 hrs)</p>

VIII. Metodología y estrategias didácticas

Metodología Institucional:

Estrategias del Modelo UACJ Visión 2020 recomendadas para el curso:

- a) aproximación empírica a la realidad
- b) búsqueda, organización y recuperación de información
- c) comunicación horizontal
- d) descubrimiento
- e) ejecución-ejercitación
- f) elección, decisión
- g) evaluación
- h) experimentación
- i) extrapolación y transferencia
- j) internalización
- k) investigación
- l) meta cognitivas
- m) planeación, previsión y anticipación
- n) problematización
- o) proceso de pensamiento lógico y crítico
- p) procesos de pensamiento creativo divergente y lateral
- q) procesamiento, apropiación-construcción
- r) significación generalización
- s) trabajo colaborativo

IX. Criterios de evaluación y acreditación

a) Institucionales de acreditación:

Acreditación mínima de 80% de clases programadas

Entrega oportuna de trabajos

Pago de derechos

Calificación ordinaria mínima de 7.0

Permite examen de título: no

b) [Evaluación del curso](#)

Acreditación de los temas mediante los siguientes porcentajes:

- Exámenes parciales: 30%
- Portafolio de evidencias (ensayos, reportes de ejercicios): 20%
- Examen final: 30 %
- Participación grupal e individual (discusiones, visitas y otras actividades): 20%

X. Bibliografía

Obligatoria:

- Cuevas, Gabriel; Cortés, Fernando (2003). *Introducción a la química computacional*, Fondo de Cultura Económica, México D.F.

Recomendada:

- Anderson, Jay Martin (2003). *Mathematics for Quantum Chemistry*, Dover Ed., New York.
- De la Peña, Luis (2008). *Introducción a la mecánica cuántica*, Fondo de Cultura Económica, México, D.F.
- Pauling, Linus; Wilson, E. Bright Jr. (2006). *Introduction to Quantum Mechanics with Applications to Chemistry*, Dover Ed., New York.

Revistas:

- International Journal of Quantum Chemistry
- Reviews of Modern Quantum Chemistry

X. Perfil deseable del docente

- Profesor investigador con maestría o doctorado, con experiencia en investigación en química teórica y herramientas computacionales.

XI. Institucionalización

Responsable del Departamento: Dr. Antonio de la Mora Covarrubias

Coordinador/a del Programa: Dra. Katya Aimee Carrasco Urrutia

Fecha de elaboración: 18/diciembre 2014

Elaboró: Dr. Marcos Delgado Ríos

Fecha de rediseño: 11/Marzo/2016

Rediseño: Dr. Marcos Delgado Ríos