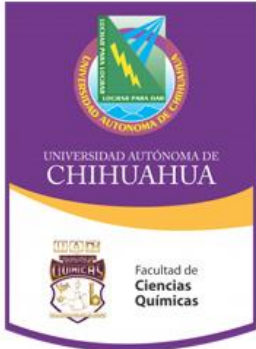


| | | |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <p style="text-align: center;">UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE CHIHUAHUA</p>  <p style="text-align: center;">FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS</p> <p style="text-align: center;">PROGRAMA DEL CURSO: QUÍMICA TEORICA Y COMPUTACIONAL</p> | DES: | Ingeniería |
| | Programa(s) Educativo(s): | Maestría en Ciencias en Química |
| | Tipo de materia (Obli/Opta): | Optativa |
| | Clave de la materia: | 206MQ |
| | Semestre: | 3° |
| | Área en plan de estudios (B, P, E): | |
| | Créditos | 6 |
| | Total de horas por semana: | 6 |
| | <i>Teoría: Presencial o Virtual</i> | 3 |
| | <i>Laboratorio o Taller:</i> | 3 |
| | <i>Prácticas:</i> | |
| | <i>Trabajo extra-clase:</i> | |
| | Créditos Totales: | 6 |
| | Total de horas semestre (x 16 sem): | 96 |
| Fecha de actualización: | Enero 2017 | |
| Prerrequisito (s): | | |
| <p>Propósito del curso :</p> <p>Utiliza los diversos métodos teóricos para estudiar las propiedades físico-químicas mediante el uso de paquetes computacionales químico-cuánticos, lo que le permitirá identificar cómo los métodos teóricos pueden apoyar el trabajo experimental y desarrollará una visión crítica de las interpretaciones de fenómenos a nivel molecular.</p> | | |
| COMPETENCIAS (Tipo y nombre de las competencias) | DOMINIOS COGNITIVOS (Objetos de aprendizaje, temas y subtemas) | RESULTADOS DE APRENDIZAJE |
| <p>QUIM4 Química teórica y computacional. Aplica los fundamentos y métodos de la química teórica con énfasis en el modelado de fenómenos fisicoquímicos que permita dar respuesta a problemáticas del entorno en las áreas de salud, medio ambiente y energía.</p> <p>CG2 Gestión del conocimiento Demuestra conocimientos y habilidades para la búsqueda, análisis crítico, síntesis y procesamiento de información para su transformación en conocimiento con actitud ética.</p> | <p>1 Teoría de Orbitales Moleculares 1.1 Definición de base y conjuntos ortonormales. 1.2 Principio variacional. 1.3 Aproximación Born-Oppenheimer. 1.4 Combinación lineal de orbitales atómicos CLOA. 1.5 Función de onda de muchos electrones.</p> | <p>Accede a diferentes fuentes de información de calidad (2-CG2).</p> <p>Construye modelos para la descripción teórica de sistemas y fenómenos químicos (1-QUIM4).</p> <p>Utiliza un segundo idioma, preferentemente el inglés, con claridad y corrección para comunicarse en contextos cotidianos, académicos, profesionales y científicos (5-CG3).</p> |

| | | |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <p>CG3 Comunicación científica Difunde con responsabilidad ética y social el conocimiento científico, tecnológico, artístico y/o humanístico que produce de forma objetiva.</p> | <p>2 Métodos de cálculo de Estructura Electrónica. 2.1 Métodos <i>Ab-initio</i>. 2.1.1 Teoría Hartree-Fock. 2.1.2 Correlación electrónica. 2.2 Funciones de base. 2.2.1 Tipos de funciones de base. 2.3 Métodos Semiempíricos 2.3.1 Método de Hückel y Hückel extendido. 2.3.2 Métodos CNDO, INDO, MINDO, AM1, PM3, PM5 y PM6. 2.4 Teoría de Funcionales de la Densidad (DFT). 2.4.1 Teoremas de Hohenber-Kohn. 2.4.2 Ecuaciones de Kohn-Sham. 2.4.3 Algoritmo de DFT. 2.4.4 Cálculo de estructura electrónica en sólidos.</p> <p>3 Cálculo de Propiedades Químicas. 3.1 Optimización de la geometría molecular. 3.1.1 Superficie de energía potencial. 3.2 Frecuencias Vibracionales. 3.2.1 Espectros Infrarrojos (IR). 3.3 Propiedades electrónicas. 3.4 Reactividad Química global y local. 3.5 Propiedades de estado basal. 3.6 Propiedades de estado excitado.</p> | <p>Construye el Hamiltoniano y escribe la ecuación de Schrödinger de sistemas polielectrónicos (6-QUIM4).</p> <p>Identifica la manera en que las interacciones a nivel atómico, molecular y mesoscópico determinan la estructura y propiedades de la materia (2-QUIM4).</p> <p>Utiliza paquetes de visualización para interpretar los resultados de las simulaciones (5-QUIM4).</p> <p>Justifica la selección de la metodología de cálculo apropiada a la entidad molecular bajo estudio (8-QUIM4).</p> <p>Explica la teoría, el modelado molecular y la simulación computacional para la selección de los componentes adecuados en el desarrollo de nuevos materiales (3-QUIM4).</p> <p>Identifica la manera en que las interacciones a nivel atómico, molecular y mesoscópico determinan la estructura y propiedades de la materia (2-QUIM4).</p> <p>Utiliza los métodos de química computacional</p> |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

| | | |
|--|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| | <p>4 Mecánica y Dinámica Molecular</p> <p>4.1 Ecuación y términos de energía potencial.</p> <p>4.2 Campos de Fuerza.</p> <p>4.3 Potenciales de interacción de dinámica molecular.</p> <p>4.4 Algoritmos de integración de velocidades.</p> <p>4.5 Propiedades termodinámicas.</p> <p>4.6 Funciones de correlación.</p> | <p>y teórica para la interpretación de resultados experimentales (4-QUIM4).</p> <p>Aplica los elementos fundamentales de la redacción científica (3-CG3).</p> <p>Analiza y recupera información pertinente mediante diversas estrategias de búsqueda de datos científicos (3-CG2).</p> <p>Construye modelos para la descripción teórica de sistemas y fenómenos químicos (1-QUIM4).</p> <p>Explica la teoría, el modelado molecular y la simulación computacional para la selección de los componentes adecuados en el desarrollo de nuevos materiales (3-QUIM4).</p> <p>Evalúa de manera crítica la información considerando su calidad y pertinencia (4-CG2).</p> <p>Construye la función de partición de sistemas de muchas partículas (7-QUIM4).</p> |
|--|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

| OBJETO DE APRENDIZAJE | METODOLOGIA (Estrategias, secuencias, recursos didácticos) | EVIDENCIAS DE APRENDIZAJE |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------|
| <p>Teoría de Orbitales Moleculares</p> <p>Accede a diferentes fuentes de información de calidad (CG2).</p> | <p>Esquemas</p> <p>Cuadros comparativos</p> <p>Cartografía conceptual</p> <p>Aprendizaje basado en problemas</p> <p>Reporte de Laboratorio</p> | <p>Resolución de problemarios y cuestionarios mediante consulta grupal en bases</p> |

| | | |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <p>Construye modelos para la descripción teórica de sistemas y fenómenos químicos (1-QUIM4).</p> <p>Utiliza un segundo idioma, preferentemente el inglés, con claridad y corrección para comunicarse en contextos cotidianos, académicos, profesionales y científicos (CG3).</p> <p>Métodos de cálculo de Estructura Electrónica Construye el Hamiltoniano y escribe la ecuación de Schrödinger de sistemas polielectrónicos (6-QUIM4).</p> <p>Identifica la manera en que las interacciones a nivel atómico, molecular y mesoscópico determinan la estructura y propiedades de la materia (2-QUIM4).</p> <p>Utiliza paquetes de visualización para interpretar los resultados de las simulaciones (5-QUIM4).</p> <p>Justifica la selección de la metodología de cálculo apropiada a la entidad molecular bajo estudio (8-QUIM4).</p> <p>Cálculo de Propiedades Químicas.</p> | <p>Secuencia didáctica Proyectos de investigación Investigación documental Resolución de problemas y ejercicios Minicolloquios Aprendizaje autónomo y reflexivo Prácticas supervisadas Juegos de roles Aprendizaje cooperativo Simuladores Construcción de dispositivos Proyector, Marcadores Pizarrón Guía de estudio Bases de datos Software especializado Instrumentos analíticos</p> | <p>de datos.</p> <p>Cartografía Conceptual presentada en inglés sobre tópicos de orbitales moleculares.</p> <p>Desarrollo de métodos y cálculos computacionales empleando paquetes químico cuánticos.</p> <p>Elaboración de Tablas de resultados</p> <p>Elaboración de una bitacora de resultados.</p> <p>Cuadro comparativo mostrando un exhaustivo análisis de los diferentes métodos de estructura electrónica</p> <p>Elaboración de un proyecto de investigación</p> |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

| | | |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <p>Explica la teoría, el modelado molecular y la simulación computacional para la selección de los componentes adecuados en el desarrollo de nuevos materiales (3-QUIM4).</p> <p>Identifica la manera en que las interacciones a nivel atómico, molecular y mesoscópico determinan la estructura y propiedades de la materia (2-QUIM4).</p> <p>Utiliza los métodos de química computacional y teórica para la interpretación de resultados experimentales (4-QUIM4).</p> <p>Aplica los elementos fundamentales de la redacción científica (CG3).</p> <p>Analiza y recupera información pertinente mediante diversas estrategias de búsqueda de datos científicos (CG2).</p> <p>Mecánica y Dinámica Molecular Construye modelos para la descripción teórica de sistemas y fenómenos químicos (1-QUIM4).</p> <p>Explica la teoría, el modelado molecular y la simulación computacional para la selección de los componentes adecuados en el desarrollo de nuevos materiales (3-QUIM4).</p> | | <p>en el que compara los diferentes parámetros para el cálculo de propiedades físico-químicas.</p> <p>Presentación de un cartel con la publicación de resultados de cálculos teóricos.</p> <p>Escritura en inglés de artículo de divulgación con resultados obtenidos.</p> <p>Programa desarrollado para el cálculo de sistemas en fase sólida, líquida o gaseosa.</p> <p>Generación de gráficas de alta calidad empleando paquetería científica.</p> |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

| | | |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--|--|
| <p>Evalúa de manera crítica la información considerando su calidad y pertinencia (CG2).</p> <p>Construye la función de partición de sistemas de muchas partículas (7-QUIM4).</p> | | |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--|--|

| FUENTES DE INFORMACIÓN (Bibliografía, direcciones electrónicas) | EVALUACIÓN DE LOS APRENDIZAJES (Criterios e instrumentos) |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <p>LIBROS</p> <p>* Andrés J., Beltrán J. Química Teórica y Computacional. Publicacions de la Universitat Jaume I. Castelló de la Plana. (2000).</p> <p>* Young D. Computational Chemistry. A Practical Guide for Applying Techniques to Real world problems. Wiley – Interscience. Oxford : Wiley-Blackwell (2011).</p> <p>* Bertran J., Branchadell V., Moreno M. and Sodupe M. Química Cuántica. Fundamentos y Aplicaciones Computacionales. Ed. Síntesis. (2002).</p> <p>* Foresman James B., Frisch AEleen. Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods. Segunda Edición. Gaussian Inc. Pittsburg PA (1996).</p> <p>* Pearson, R. G. Chemical Hardness. Ed. John Wiley & Sons (1997).</p> <p>* Jensen F. Introduction to Computational Chemistry. Ed. John Wiley & Sons (1999).</p> <p>* Cramer Christopher J. Essentials of Computacional Chemistry. Theories and Models. Wiley (2013).</p> | <p>Continua: (20 %)</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ Participación diaria. ▪ Resolución de problemas numéricos y cuestionarios. ▪ Presentación de reportes. ▪ Investigación diaria. ▪ Realización de tareas asignadas. <p>Reconocimientos parciales: (30 %)</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ Evaluación Escrita. ▪ Actividades integradoras y de aplicación de conocimientos. <p>Reconocimiento final: (50 %)</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ Presentación de un artículo de divulgación con los resultados obtenidos de la simulación computacional del sistema molecular seleccionado. ▪ Proyecto de investigación. <p>Criterios de evaluación del artículo y proyecto:</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 |

| | |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <p>* Francisco Dominguez-Adame Física del Estado Sólido: Teoría y Métodos Numéricos, Ediciones Paraninfo. (2001).</p> <p>* M. Haile Molecular Dynamics Simulation: Elementary Methods, J, Wiley (2010).</p> <p>* Ira N. Levine Quantum Chemistry. Boston-Pearson, 7th Edition (2014).</p> | <ol style="list-style-type: none"> 5. Determinación teórica de la mayor cantidad posible de propiedades moleculares. 6. Discusión de resultados. 7. Conclusión 8. Aporte científico. <p>Criterios de Co-evaluación:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Rúbrica para la evaluación de documentos, artículos, resúmenes, etc. 2. comprobantes de aceptación de resúmenes de trabajos que fueron co-evaluados para presentarse como poster o ponencia. 3. Responsabilidad y ética de los co-evaluadores. |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

Cronograma del avance programático

| Objetos de aprendizaje | Semanas | | | | | | | | | | | | | | | |
|-------------------------------------------------|---------|---|---|---|---|---|---|---|---|----|----|----|----|----|----|----|
| | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 | 12 | 13 | 14 | 15 | 16 |
| 1. Teoría de Orbitales Moleculares | x | x | x | | | | | | | | | | | | | |
| 2. Métodos de cálculo de Estructura Electrónica | | | | x | x | x | x | x | | | | | | | | |
| 3. Cálculo de Propiedades Químicas | | | | | | | | | x | x | x | x | | | | |
| 4. Mecánica y Dinámica Molecular | | | | | | | | | | | | | x | x | x | x |