

Nombre de la entidad:	DIVISIÓN DE CIENCIAS E INGENIERÍAS, CAMPUS LEÓN
Nombre del Programa Educativo:	INGENIERÍA FÍSICA INGENIERÍA BIOMÉDICA INGENIERÍA QUÍMICA SUSTENTABLE LICENCIATURA EN FÍSICA

Nombre de la unidad de aprendizaje:	Simulación Molecular y Química Computacional	Clave:	III105034
-------------------------------------	---	--------	------------------

Fecha de aprobación:	13/06/2011	Elaboró:	Susana Figueroa Gerstenmaier, Leonardo Álvarez Valtierra
Fecha de actualización:	05/05/2015		

Horas de acompañamiento al semestre:	72	Créditos:	5
--------------------------------------	----	-----------	----------

Horas de trabajo autónomo al semestre:	53	Docente: Horas/semana/semestre	4
--	----	--------------------------------	---

Caracterización de la Unidad de Aprendizaje							
Por el tipo del conocimiento	Disciplinaria	X	Formativa		Metodológica	Área del conocimiento:	INGENIERÍA E INDUSTRIA
Por la dimensión del conocimiento	Área General		Área Básica Común		Área Básica Disciplinar	Área de Profundización	X Área Complementaria
Por la modalidad de abordar el conocimiento	Curso	X	Taller		Laboratorio	Seminario	
Por el carácter de la materia	Obligatoria		Recursable		Optativa	Selectiva	Acreditable

Prerrequisitos	
Normativos	Ninguno
Recomendables	Termodinámica y Termodinámica Química, Mecánica Estadística, Química Cuántica y Lenguaje de Programación

Perfil del Docente:

Contribución de la Unidad de Aprendizaje al perfil de egreso del programa educativo:
1. Demostrar una comprensión profunda de los conceptos y principios fundamentales de física y química (pensando que las matemáticas son una herramienta). 12. Realizar investigación aplicada (innovación de tecnología y uso de tecnologías emergentes). 14. Plantear, analizar y resolver problemas físicos, químicos y fisicoquímicos, tanto teóricos como

experimentales, mediante la utilización de método analíticos, experimentales o numéricos.

15. Aplicar el conocimiento teórico de la Física, Química y Fisicoquímica en la realización de proyectos de ingeniería.

16. Utilizar y elaborar programas o sistemas de computación para el procesamiento de información, cálculo numérico, simulación de procesos o control de experimentos.

19. Demostrar hábitos de trabajo necesarios para el desarrollo de la profesión tales como el trabajo en equipo, el rigor científico, el auto aprendizaje y la persistencia y creatividad.

Contextualización en el plan de estudios:

El objeto de estudio de este curso es un conjunto de técnicas para calcular propiedades de sistemas termodinámicos, y en particular de la materia en fase fluida. Por otra parte, combina el uso de cálculos de Química Computacional para predecir la estructura y propiedades de moléculas.

Aplicaciones: Finalmente el estudiante implementará su propio código (a elegir, Monte Carlo o Dinámica Molecular) para modelar algún problema simple, por ejemplo, el cálculo de algún punto de estado termodinámico de un fluido Lennard-Jones y utilizando la Química Computacional, predecir la estructura y algunas propiedades de una molécula particular usando alguno de los software diseñados para este propósito.

Esta última parte se espera que se desarrolle extra clase.

La metodología de enseñanza que se sugiere, para un mejor aprovechamiento de la materia, es la siguiente:

En las clases de teoría se expondrán los conceptos y las técnicas descritos arriba. En las clases de práctica (o taller) se supervisará que el estudiante implemente lo aprendido. Ésta es una asignatura con una importante componente de orden práctico; la idea es aprender haciendo. Si no se hace de este modo, el estudiante perderá la motivación y probablemente olvidará lo aprendido.

Para facilitar el aprendizaje de esta materia, se recomienda fuertemente haber cursado las asignaturas de Termodinámica y Termodinámica Química, Mecánica Estadística, química cuántica y Lenguaje de Programación previamente. Esta asignatura proveerá los insumos para describir tanto cualitativa como cuantitativamente fenómenos observados en moléculas y sistemas termodinámicos simples, y su extensión a sistemas más complejos en cursos subsecuentes de posgrado de diversas áreas como Física, Química, Biología, Ingeniería Química, Ciencia de Materiales y Nanotecnología por citar solo algunas de las áreas de aplicación.

Competencia de la Unidad de Aprendizaje:

- Aplicar los conceptos, definiciones y herramientas adquiridos durante el curso a la solución numérica y computacional de problemas planteados en el marco de la Termodinámica Estadística y la Química Cuántica.
- Aprender a calcular propiedades termodinámicas, dinámicas y estructurales de sistemas macroscópicos a partir de sus contribuciones microscópicas.
- Aprender el uso de la Química Computacional para predecir reactividad química, propiedades espectroscópicas, y obtener parámetros que contribuyen a la comprensión del comportamiento fisicoquímico de las moléculas.
- Aprender el uso de la Simulación Molecular como una poderosa herramienta para contrastar soluciones analíticas (teoría), resolver problemas que no tienen solución analítica y substituir datos experimentales cuando no se tienen o son difíciles de adquirir. Explicar y predecir fenómenos fisicoquímicos con los conocimientos adquiridos.

Contenidos de la Unidad de Aprendizaje:

- I. Introducción
- II. Química Computacional (Métodos *ab initio*)
- III. Técnicas de Simulación
- IV. Dinámica Molecular

Actividades de aprendizaje

Recursos y materiales didácticos

<ul style="list-style-type: none"> Asistencia a seminarios de la División de Ciencias e Ingenierías, en particular aquellos de Termodinámica Estadística y de Simulación Molecular. 	<ul style="list-style-type: none"> Recursos didácticos: Pizarrón, proyector de acetatos, computadora, cañón, bibliografía, aula de cómputo, red. Materiales didácticos: Acetatos, plumones para acetatos.
--	---

Productos o evidencias del aprendizaje	Sistema de evaluación:
<ul style="list-style-type: none"> Tareas Examen 	<p>EVALUACIÓN: Será continua y permanente y se llevará a cabo en 3 momentos:</p> <p>Diagnóstica: Por medio de un examen escrito muy breve o por preguntas generales en clase, el profesor puede estimar el conocimiento matemático, termodinámico y computacional con que cuentan los alumnos.</p> <p>Formativa: Participación en clase y tareas.</p> <p>Sumaria: Examen final escrito de conocimientos y un proyecto de simulación funcionando y calculando correctamente propiedades termodinámicas en formato electrónico.</p> <p>PONDERACIÓN (SUGERIDA):</p> <ul style="list-style-type: none"> Examen: 50% Participación individual: 10% Proyecto desarrollado (Química computacional y Simulación Molecular) 40%

Fuentes de información	
Bibliográficas:	Otras:
<p>BÁSICA Para la parte de Simulación Molecular</p> <ol style="list-style-type: none"> Allen, M. P.; Tildesley, D. J. Computer Simulation of Liquids; Clarendon Press: Oxford, 1987. Frenkel, D.; Smit, B. Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications, 2nd ed.; Academic Press: U. S. A., 2002. McQuarrie, D. A. Statistical Mechanics, University Science Books: USA, 2000. <p>Para la parte de Química Computacional</p> <ol style="list-style-type: none"> Andrew R. Leach, Molecular Modelling (Principles and Applications), Edinburgh, Longmann, 1996. Levine, Ira N., Quantum Chemistry, 5th ed, Prentice Hall, 1999. McQuarrie, Donald A. y Simon, John D., Physical Chemistry: A Molecular Approach, University Science Books, 1997. Lowe, John P., Quantum Chemistry, 2nd ed, Academic Press, 1997. 	<p>Para Simulación Molecular</p> <ul style="list-style-type: none"> http://www.ccp5.ac.uk/ http://www.gromacs.org/ http://www.princeton.edu/che/people/faculty/panagiotopoulos/group/ http://www.theo.chemie.tu-darmstadt.de/group/services/yaspdoc/yaspdoc.html <p>Para Química Computacional</p> <ul style="list-style-type: none"> http://www.gaussian.com/ http://www.abinit.org/