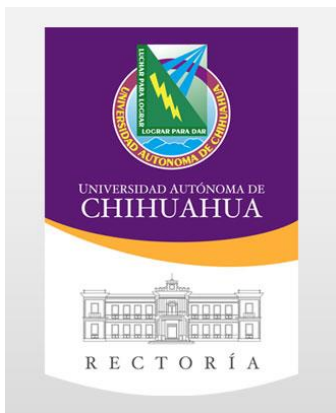


UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE CHIHUAHUA



UNIDAD ACADÉMICA

PROGRAMA DEL CURSO:

Química Computacional

DES: Ingeniería

Programa(s) Educativo(s): Ingeniero Químico, Químico, Químico Bacteriólogo Parasitólogo.

Tipo de materia: Optativa

Clave de la materia: QU713

Semestre: 7mo.

Área en plan de estudios: Núcleo Profesional.

Créditos: 4

Total de Horas por Semana: 4

- Teoría: 2
- Práctica:
- Taller:
- Laboratorio: 2
- Prácticas Complementarias:
- Trabajo extra-clase:

Total de horas en el Semestre: 64

Fecha última de actualización Curricular: Abril 2019

Clave y Materia requisito: 100 créditos

Propósitos del curso

- **Presentar a la Química Computacional como una descripción matemática de la Química realizada en una computadora.**
- **Realizar cálculos de propiedades moleculares empleando programas de Química Computacional.**

| Competencias (Tipo y Nombre de las Competencias) | Contenidos (Unidades, Temas y Subtemas) | Resultados de Aprendizaje (Por unidad) |
|--|--|--|
| B2 SOLUCIÓN DE PROBLEMAS. B3 COMUNICACIÓN B4 EMPRENDEDOR | 1 Introducción a la Química Computacional (QC). 1.1 Principios Fundamentales. 1.2 Ejemplos de la aplicación de QC a problemas actuales. | 1. Analiza los conceptos y fundamentos básicos de la Química Computacional. |
| B5 TRABAJO EN EQUIPO Y LIDERAZGO P6 INVESTIGACIÓN. | 2 Métodos de Química Computacional 2.1 Mecánica Molecular 2.1.1 Teoría Básica. 2.1.2 Aplicación de los métodos de Mecánica Molecular. | 1. Determina propiedades de las sustancias químicas aplicando conceptos de Mecánica Molecular. |
| | 2.2 Métodos de Estructura Electrónica | |

| | | |
|--|---|--|
| | <p>2.2.1 Semiempíricos. 2.2.1.1 Definición de los métodos más conocidos. 2.2.1.2 Aplicaciones.</p> | <ol style="list-style-type: none"> 1. Analiza conceptos de los métodos Semiempíricos. 2. Determina propiedades moleculares aplicando diferentes métodos semiempíricos. |
| | <p>2.2.2 Ab-initio. 2.2.2.1 Método Hartree-Fock. 2.2.2.2 Aplicaciones</p> | <ol style="list-style-type: none"> 1. Analiza conceptos de los métodos <i>ab-initio</i>. 2. Analiza y decide donde, cuando y el porqué emplear métodos <i>ab-initio</i>. |
| | <p>2.2.3 Teoría de Funcionales de la Densidad (DFT). 2.2.3.1 Teoría Básica. 2.2.3.2 Funcionales tradicionales. 2.2.3.3 Aplicaciones.</p> | <ol style="list-style-type: none"> 1. Conoce y Analiza conceptos básicos de la Teoría de Funcionales de la Densidad. 2. Evalúa, establece comparaciones y decide qué tipo de funcional empleará para sus cálculos computacionales moleculares. |
| | <p>3 Uso y Manejo de Programas de QC. 3.1 Manejo de paquetes computacionales: <i>Gaussian</i>®03W, Caché, GaussView, Materials Studio 3.2 y HyperChem entre otros.</p> | <ol style="list-style-type: none"> 1. Desarrolla habilidades en el manejo de programas de simulación computacional, interpretando mediante los conocimientos adquiridos, los resultados obtenidos de su simulación molecular. |
| | <p>4 Cálculo de Propiedades Químicas. 4.1 Estructura Molecular 4.2 Frecuencias Vibracionales. Espectros Infrarrojos IR 4.3 Propiedades electrónicas. 4.4 Afinidad Electrónica y potencial de Ionización.</p> | <ol style="list-style-type: none"> 1. Determina las propiedades moleculares con la ayuda de los paquetes computacionales. 2. Interpreta y analiza los resultados obtenidos, estableciendo comparaciones y elaborando conclusiones propias. |
| | <p>5 Reactividad Química Teórica 5.1 Reactividad Global. 5.1.1 Electronegatividad 5.1.2 Blandura Química 5.1.3 Dureza Química 5.2 Reactividad y Selectividad Locales. 5.2.1 Índices de Fukui 5.2.2 Blandura Local 5.2.3 Dureza Local</p> | <ol style="list-style-type: none"> 1. Efectúa un estudio de reactividad química teórica global y local para sistemas moleculares de su elección. |

Evaluaciones

Continúa:

- Actividades preliminares sobre el conocimiento del tema.
- Participación diaria.
- Presentación de reportes.
- Investigación diaria.
- Realización de Tareas asignadas.

Reconocimientos parciales:

- Actividades de aplicación de conocimientos, tales como: la simulación de sistemas moleculares empleando los diferentes métodos de estructura electrónica,
- Actividades Integradoras del conocimiento.
- Evaluación Escrita.

Reconocimiento final:

- Presentación de un proyecto sencillo de investigación científica.

Criterios de evaluación:

1. Sistemas moleculares de interés actual.
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 Computacional
5. Determinación teórica de la mayor cantidad posible de propiedades moleculares.
6. Discusión de resultados.
7. Aporte científico.

Bibliografía**LIBROS**

Andrés J., Beltrán J. *Química Teórica y Computacional*. Publicacions de la Universitat Jaume I. Castelló de la Plana. (2000).

Young D. *Computational Chemistry. A Practical Guide for Applying Techniques to Real world problems*. Wiley – Interscience. Ed. John Wiley & Sons. (2001).

Bertran J., Branchadell V., Moreno M. and Sodupe M. *Química Cuántica. Fundamentos y Aplicaciones Computacionales*. Ed. Síntesis. (2000).

Foresman James B., Frisch Aileen. 1996. *Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods*. Segunda Edición. Gaussian Inc. Pittsburg PA.

Pearson, R. G. *Chemical Hardness*. Ed. John Wiley & Sons (1997).

Jensen F. *Introduction to Computational Chemistry*. Ed. John Wiley & Sons (1999).

Cramer Christopher J. *Essentials of Computational Chemistry. Theories and Models*. Segunda Edición. Ed. John Wiley & Sons, Ltd. (2004).

LECTURAS SUGERIDAS

Fuentes-Montero M. E., Contreras-Vega C., Chávez-Rojó M. A., Olivas-Vargas R., Valdez-Aguirre A., Rodríguez-Valdez L. M. *Introducción a los Métodos de la Química Computacional*. Facultad de Ciencias Químicas. Universidad Autónoma de Chihuahua (2009).

Chávez-Rojó M. A., Rodríguez-Valdez L. M., Fuentes-Montero M. E., Olivas-Vargas R. *Principios de Simulación Computacional de Líquidos*. Facultad de Ciencias Químicas. Universidad Autónoma de Chihuahua (2009).

Rodríguez-Valdez L. M., Fuentes-Montero M. E., Chávez-Rojó M. A., Olivas-Vargas R., Contreras-Vega C. *Teoría de Funcionales de la Densidad*. Facultad de Ciencias Químicas. Universidad Autónoma de Chihuahua (2009).

Elaboración:

Dra. Luz María Rodríguez Valdez _____

Abril 2019