UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE CHIHUAHUA

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE CHIHUAHUA

UNIDAD ACADÉMICA:
FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS

PROGRAMA DEL CURSO:

QUÍMICA TEÓRICA Y COMPUTACIONAL

DES:	Ingeniería
Programa(s) académico(s)	Maestría en Ciencias en Química. Doctorado en Ciencias.
Tipo de Materia: Obligatoria / Optativa	Optativa
Clave de la Materia:	MQ307
Semestre:	Tercero
Área en plan de estudios (B, P, E, O):	E
Total de horas por semana:	6
Laboratorio o Taller:	0
h./semana trabajo presencial/virtual	4
h./semana laboratorio/taller	0
h. trabajo extra-clase:	**2**
Total de horas por semestre: Total de horas semana por 16 semanas	96
Créditos totales:	6
Fecha de actualización:	21/02/2024
Responsable(s) del diseño del programa del curso:	Juan Pedro Palomares Báez. Luz María Rodríguez Valdez. José Manuel Nápoles Duarte.
Prerrequisito (s):	Ninguno

DESCRIPCIÓN DE LA UNIDAD DE APRENDIZAJE/ CURSO:
Utiliza los diversos métodos teóricos para estudiar las propiedades fisicoquímicas 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.

COMPETENCIA PRINCIPAL QUE SE DESARROLLA:
QUIM4. Química Teórica y Computacional.
Aplica los métodos de la química teórica y computacional en el modelado de fenómenos fisicoquímicos que contribuyen a la verificación de hipótesis en la resolución de problemas multidisciplinarios.

OTRAS COMPETENCIAS A LAS QUE SE CONTRIBUYE CON EL DESARROLLO DE LA UNIDAD DE APRENDIZAJE/CURSO:
G3. Fronteras del conocimiento y liderazgo científico.

DOMINIOS	OBJETOS DE ESTUDIO	RESULTADOS DE APRENDIZAJE	METODOLOGÍA	EVIDENCIAS DE DESEMPEÑO
G3.1 Desarrollo del pensamiento crítico	**Objeto de estudio 1.** **Teoría de Orbitales Moleculares.**	Usa diferentes fuentes de información de calidad.	Exposición del profesor. Investigaciones. Computadora.	Cuestionario. Exposición. Examen escrito.

a partir de la libertad, el análisis, la reflexión y la argumentación.	1. Definición de base y conjuntos ortonormales. 2. Principio variacional. 3. Aproximación Born-Oppenheimer. 4. Combinación lineal de orbitales atómicos CLOA. 5. Función de onda de muchos electrones.	Reconoce los fundamentos de la teoría de orbitales moleculares.	Tareas Individuales.	
QUIM4.1 Construye modelos para la descripción teórica de sistemas y fenómenos químicos, a partir de las interacciones a nivel atómico, molecular y mesoscópico. **QUIM4.5** Justifica la selección de la metodología de cálculo apropiada a la entidad molecular bajo estudio.	**Objeto de estudio 2.** **Métodos de cálculo de Estructura Electrónica.** 2.1 Métodos Ab-initio. 2.1.1Teoría Hartree-Fock. 2.1.2Correlación electrónica. 2.2 Funciones de base. 2.2.1 Tipos de funciones de base. 2.3 Métodos semiempíricos 2.4 Teoría de Funcionales de la Densidad (DFT). 2.5 Cálculo de estructura electrónica en sólidos.	Construye el Hamiltoniano y escribe la ecuación de Schrödinger de sistemas polielectrónicos. Explica la teoría, el modelado molecular y la simulación computacional para la selección de los componentes adecuados en el desarrollo de nuevos materiales.	Exposición del profesor.. Investigaciones. Computadora. Tareas Individuales. Prácticas de laboratorio.	Cuestionario. Exposición. Examen escrito. Informes de prácticas de laboratorio.
G3.7 Habilidades digitales y uso responsable de las tecnologías de la información, comunicación, conocimiento y aprendizaje, en el proceso de construcción de saberes. **QUIM4.2** Utiliza los métodos de química computacional y teórica para la interpretación de resultados experimentales.	**Objeto de estudio 3.** **Cálculo de Propiedades Químicas.** 3.1 Optimización de la geometría molecular. 3.2 Frecuencias vibracionales. 3.3 Espectros Infrarrojos (IR). 3.4 Propiedades electrónicas. 3.5 Reactividad química. 3.6 Propiedades de estado basal y de estado excitado.	Emplea paquetes de cálculo y de visualización para el análisis e interpretación de resultados teóricos y, experimentales. Reconoce la manera en que las interacciones a nivel atómico y molecular determinan la estructura y propiedades de la materia.	Exposición del profesor. Investigaciones. Computadora. Tareas Individuales. Prácticas de laboratorio.	Cuestionario. Exposición. Examen escrito. Informes de prácticas de laboratorio.

FUENTES DE INFORMACIÓN

Andrés, J., & Beltrán, J. (2013). Química teórica y computacional. Universitat Jaume I. Servei de Comunicació i Publicacions.

Young, D. (2004). Computational chemistry: a practical guide for applying techniques to real world problems. John Wiley & Sons.

Rusca, J. B., Ferrer, M. M., Gallo, V. B., & Roura, M. S. (2002). Química cuántica. Fundamentos y aplicaciones computacionales.

Frisch, A. E., & Foresman, J. B. (1996). Exploring chemistry with electronic structure methods. Pittsburgh PA: Gaussian Inc, 302, 3-2.

EVALUACIÓN DE LOS APRENDIZAJES

Continua 25%:

- Informes de prácticas.
- Resolución de cuestionarios.
- Asistencia.
- Realización de tareas asignadas.

Reconocimientos parciales 25%:

- Evaluación Escrita.
- Avances de actividades integradoras.

Trabajo integrador final 50%:
Presentación escrita de un artículo con los resultados obtenidos de la simulación computacional del sistema molecular seleccionado, así como la defensa oral de los mismos

Pearson, R. G. (1997). Chemical hardness (Vol. 10, No. 3527606173). Weinheim: Wiley-VCH.

Jensen, F. (2017). Introduction to computational chemistry. John wiley & sons.

Cramer, C. J. (2013). Essentials of computational chemistry: theories and models. John Wiley & Sons.

Dominguez-Adame, F. (2001). Física del estado sólido: teoría y métodos numéricos. International Thomson Editores Spain.

Haile, J. M. (1992). Molecular dynamics simulation: elementary methods. John Wiley & Sons, Inc..

Ira N. L. (2014) Quantum Chemistry. Boston-Pearson, 7th Edition.

Criterios de evaluación:
1. Sistemas moleculares de interés 10%.
2. Justificación acerca de la importancia y relevancia del sistema molecular seleccionado 10%.
3. Fundamentos teóricos 10%
4. Aplicación de los conocimientos adquiridos durante el curso 15%.
5. Determinación de propiedades moleculares 15%.
6. Discusión de resultados 30%.
7. Conclusión 10%.

Perfil del docente que impartirá el curso.

El docente deberá tener estudios de Doctorado en ciencias, preferentemente en las áreas de química, física o materiales, poseer conocimientos sobre química teórica y computacional, manejo de programas de cálculos químico-cuánticos, acoplamiento y dinámica molecular. Experiencia técnica pedagógica en el área de la química, además de contar con experiencia en el desarrollo de proyectos de investigación multidisciplinares y experiencia en la redacción de artículos científicos, así como evidenciar su formación de manera continua en el área didáctica, pedagógica y disciplinar.

CRONOGRAMA DEL AVANCE PROGRAMÁTICO

Objetos de Estudio	Semanas															
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
Teoría de Orbitales Moleculares																
Métodos de cálculo de Estructura Electrónica																
Cálculo de Propiedades Químicas																