

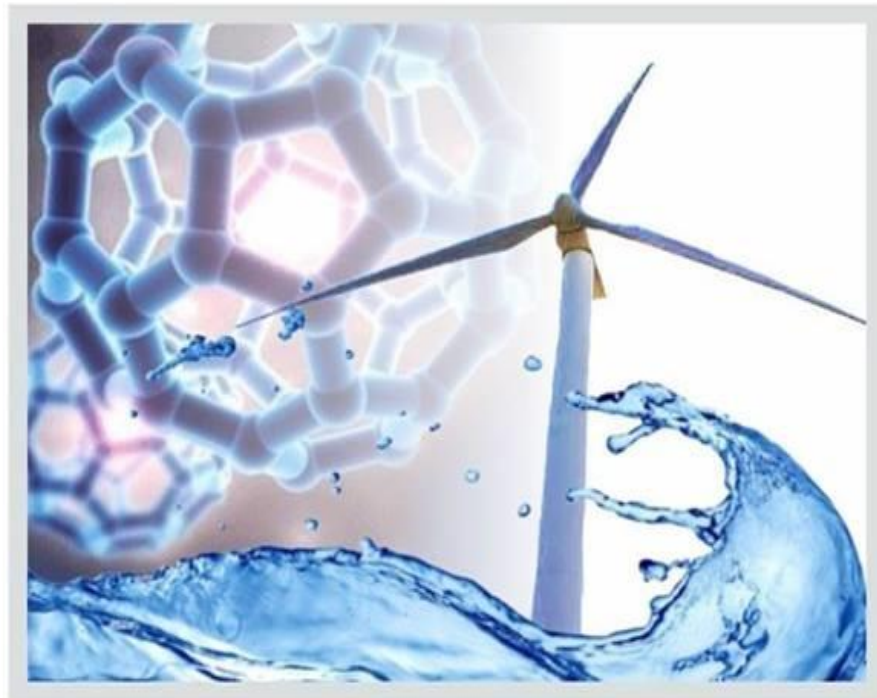


UNIVERSIDAD DE GUADALAJARA
CENTRO UNIVERSITARIO DE TONALÁ



CU Tonalá
Centro Universitario de Tonalá

Simulación Molecular



Departamento de
Ingenierías



1.- Identificación de la Unidad de Aprendizaje

Nombre de la Unidad de Aprendizaje					
Simulación Molecular					
Clave de la UA	Modalidad de la UA	Tipo de UA		Valor de créditos	Área de formación
14241	Presencial	Curso.		9	Básico particular
Hora semana		Horas teoría/semestre	Horas práctica/semestre	Total de horas:	Seriación
4		64	0	64	
Departamento			Academia		
Ingenierías			Química		
Presentación					
<p>El curso de Simulación Molecular contribuye al perfil del Ingeniero en Nanotecnología en el desarrollo de la comprensión de las aplicaciones de las leyes de la Mecánica Cuántica en el estudio de sistemas químicos (átomos, moléculas, iones, etc.); así como en el desarrollo de la habilidad para utilizar herramientas computacionales para el estudio y diseño de materiales en escala molecular y nanométrica con diferentes aplicaciones.</p>					
Unidad de competencia					
<p>Comprende las leyes de la Mecánica Cuántica que gobiernan las propiedades de la materia a escalas atómica, molecular y nanométrica. Aplica los principios de la Mecánica Cuántica, a través de software computacional, para el estudio de las propiedades físicas y químicas de la materia. Utiliza los conceptos de la Química Cuántica para explicar fenómenos químicos y diseñar nuevos materiales.</p>					
Tipos de saberes					
<p>Se refiere al desglose de aquellos conocimientos, habilidades, actitudes y valores que se encuentran ligados a la descripción de la competencia, y al desarrollarlos deben observar la parte de los nuevos aprendizajes y capacidades que logrará el estudiante</p>					
Saber	Saber hacer		Saber ser		
<p>Conceptos básicos de la Química Cuántica: enlace químico, superficie de energía potencial, electronegatividad, reactividad, etc. Aproximaciones de la Mecánica Cuántica: Método de Hartree-Fock, Métodos post-HF Aproximaciones de la Teoría de Funcionales de la Densidad Conjuntos de base Software básico para el estudio de la estructura electrónica de átomos, moléculas y nanoestructuras.</p>	<p>Los conocimientos del curso de Simulación Molecular le ayudarán al Ingeniero en Nanotecnología a aplicar las leyes de la Mecánica Cuántica en el estudio de las propiedades físicas y química de átomos, moléculas y nanoestructuras. Así mismo, dichos conocimientos le ayudarán en el diseño asistido por computadora de nuevos materiales nanométricos.</p>		<p>Al ser la Simulación Molecular un área frontera de conocimiento, su estudio ayudará al ingeniero en nanotecnología a comprender la importancia del trabajo multidisciplinario y en equipo, en un entorno de tolerancia y respeto.</p>		
Competencia genérica			Competencia profesional		
<p>Competencias de aprendizaje</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Poseer sólidas bases teóricas y metodológicas que le permiten ejercer su profesión. 2. Aplicar sus conocimientos. 3. Identificar, formular y resolver problemas. 4. Buscar, procesar y analizar información procedente de diferentes fuentes. <p>Competencias interpersonales</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Comunicarse con eficiencia en forma oral y escrita. 2. Participar en grupos de trabajo inter y 			<ol style="list-style-type: none"> 1. Conoce los conceptos básicos de Química computacional tales como el enlace químico, superficies de energía potencial, electronegatividad, etc. 2. Conoce las leyes de la Mecánica Cuántica que gobiernan las propiedades físicas y químicas de la materia. 3. Aplica los principios de la Mecánica Cuántica al estudio de las propiedades de la materia. 4. Aplica los principios de la Mecánica Cuántica en el diseño de nuevos materiales. 		



<p>multidisciplinarios.</p> <p>3. Tomar decisiones, gestionar, negociar y tener espíritu de liderazgo.</p> <p>Competencias de autonomía y desarrollo personal</p> <ol style="list-style-type: none">1. Trabajar en forma autónoma.2. Trabajar e integrarse en ambientes cambiantes. <p>Competencias relativas a los valores</p> <ol style="list-style-type: none">1. Manifestar conciencia del impacto de las soluciones tecnológicas en el contexto social y en el medio ambiente.2. Trabajar en forma responsable, profesional y ética.3. Respetar la diversidad cultural.	
Competencias previas del alumno	
<p><u>Se recomienda que el estudiante haya cursado previamente Métodos numéricos IV, Nanofísica, Química Inorgánica II, Química Orgánica y Fisicoquímica II para ser competente en:</u></p> <ol style="list-style-type: none">1. <u>Poseer conocimientos cálculo de varias variables, métodos numéricos, geometría analítica, mecánica cuántica, química orgánica e inorgánica, termodinámica y cinética química para aplicarlos en el estudio de las propiedades físicas y químicas de la material.</u>	
Competencia del perfil de egreso	
<p><u>Al término de la unidad de aprendizaje, el estudiante será competente en la aplicación de las leyes de la Mecánica Cuántica para el estudio de las propiedades físicas y químicas de la materia y el diseño de nuevos materiales.</u></p>	
Perfil deseable del docente	
<p>debe poseer formación en química, física o especialidad afín, con posgrado en Fisicoquímica Teórica y así mismo, debe poseer habilidades para transmitir conocimientos y motivar el trabajo en equipo en un espacio de tolerancia.</p>	

2.- Contenidos temáticos	
	Contenido
	<p>Módulo 1. Mecánica Cuántica</p> <ol style="list-style-type: none">1.1. Partícula en una caja en una, dos y tres dimensiones.1.2. Oscilador armónico.1.3. Átomo de Hidrógeno <p>Módulo 2. Química Cuántica</p> <ol style="list-style-type: none">2.1 Aproximación de Hartree-Fock.2.2 Métodos post-HF.2.3 Conjuntos de base y ondas planas. <p>Módulo 3. Software</p> <ol style="list-style-type: none">3.1 Gaussian 093.2 GAMESS-US3.3 Quantum Espresso
Estrategias docentes para impartir la unidad de aprendizaje	
<p>El aprendizaje se llevará a cabo a través de actividades clases teóricas y actividades prácticas desarrolladas en el laboratorio de cómputo.</p>	
Bibliografía básica	
<p>Química Cuántica, Ira N. Levine, Pearson Educación, 2001. Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory, Attila Szabo, Neil S. Ostlund, Courier Corporation, 1996. Density-Functional Theory of Atoms and Molecules, Robert G. Parr, Weitao Yang Oxford University Press, 1989.</p>	
Bibliografía complementaria	
3.-Evaluación	



Indicadores del nivel de logro

Son criterios que dan cuenta de la idoneidad con la cual se deben llevar a cabo la unidad de competencia y de manera específica cada elemento de la competencia. Se sugiere que cada indicador se acompañe de niveles de logro para orientar la formación y evaluación de manera progresiva

Saber	Saber hacer	Saber ser
Exámenes.	Tareas. Prácticas de laboratorio. Proyecto final.	Respeto y tolerancia en todas las actividades realizadas en equipo así como individuales.

Criterios de Evaluación (% por criterio)

Rango de ponderación	Indicadores	Instrumentos
0-30 %	2 exámenes departamentales.	Hojas de exámenes
0-50 %	12 Prácticas en el laboratorio de cómputo.	Reportes de prácticas
0-20 %	Proyecto de investigación aplicada.	Documento impreso y exposición
0-100%		

4.-Acreditación

Anotar los criterios para la acreditación ordinaria

LA ASISTENCIA A LAS ACTIVIDADES PRESENCIALES ES OBLIGATORIA Y LA PARTICIPACIÓN ACTIVA DEL ALUMNO EN TODAS LAS ACTIVIDADES DOCENTES SE VALORARÁ POSITIVAMENTE EN LA CALIFICACIÓN FINAL. POR ELLO, SERÁ NECESARIO:

- HABER ASISTIDO AL MENOS AL 80% DE CLASES MAGISTRALES Y TUTORÍAS**
- HABER REALIZADO SU INVESTIGACIÓN Y ENTREGADO DICHO DOCUMENTO.**

Anotar los criterios para la acreditación extraordinaria

DERECHO PARA OBTENER CALIFICACIÓN DE EXTRAORDINARIO ESTA DETERMINADO EN BASE AL REGLAMENTO DE EVALUACIÓN DE ALUMNOS DE LA UNIVERSIDAD DE GUADALAJARA.

5.- Participantes en la elaboración

Código	Nombre
2952792	Dra. Nancy Pérez Peralta

Fecha		
Elaboración	Aprobación por Academia	Próxima revisión
15 Diciembre del 2014	13 Enero del 2015	Junio 2015