



Centro Universitario de Tonalá

PROGRAMA DE ESTUDIOS					
Nombre de la Unidad de Aprendizaje					
Simulación Molecular					
Modalidad:					
Presencial					
Departamento:					
De Ciencias Básicas y Aplicadas					
Academia					
Fisicoquímica					
Área de Formación					
Área de Formación Básica Particular Obligatoria					
Clave de la materia:	Nivel:	Prerrequisitos	Co-requisitos	Tipo de asignatura	Tipo de curso:
I4241	Licenciatura				C= curso
Hrs. /semestre	Horas semana	Horas de teoría:	Horas de práctica:	Total de horas:	Valor de créditos:
64	4	1	3	4	9

Objetivo de la asignatura
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.
Aportación de la asignatura al perfil de egreso
El alumno tendrá conocimientos generales para poder hacer o interpretar modelos moleculares
Campo de aplicación profesional
En el campo de la investigación ya sea académico o empresarial para la investigación y/o desarrollo de nuevos materiales, manipulación de sistemas a escala nanométrica.
Perfil deseable del docente para impartir la asignatura
Especialidad en Química teórica, Modelado Molecular o área afín

UNIDAD 1 INTRODUCCIÓN A LINUX
OBJETIVO: Que el alumno conozca y maneje eficientemente los comandos básicos en la terminal de Linux, ya que éstos le servirán como herramienta para todo el curso
1.1 Comandos básicos de la terminal
1.2 Manejo de scripts
1.3 Editor vim

Carlos Cuzco

[Handwritten signature]

José Benito Pelayo U.

[Handwritten signature]

#

Agui Ruelas Frc.

[Handwritten signature]

[Handwritten signature]

D.M.

[Handwritten signature]

Centro Universitario de Tonalá
Licenciatura en

Referencias a fuentes de información básicas

- DannFrenkel, BerendSmit. UNDERSTANDING MOLECULAR SIMULATION. Academic Press, SanDiego, (2015) 1ª Ed.
- Cristopher J. Cramer. ESSENTIALS OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY. Wiley (2014) 2ª. Ed

Referencias a fuentes de información complementarias

- Donald A. McQuarrie. QUANTUM CHEMISTRY. University Science Books, Sausalito, California (2013) 3a Ed.
- Alan Hinchliffe. MOLECULAR MODELLING FOR BEGINNERS. Wiley (2014) 2ª. Ed.
- Andrew R. Leach. MOLECULAR MODELLING, Prentice Hall (2015) 2ª. Ed.

Cecilia Cerna

UNIDAD 2 CONCEPTOS BASICOS DE MODELADO MOLECULAR

OBJETIVO: El alumno conocerá los fundamentos del modelado molecular, aprenderá a construir la estructura de los sistemas moleculares y utilizar software para visualización de dichos sistemas.

- 2.1 Modelos, aproximaciones y realidad.
- 2.2 Definición de Química Teórica y Química Computacional
- 2.3 Geometría Molecular: Longitudes de enlace, ángulos y ángulo dihedro
- 2.4 Matriz Z
- 2.5 Construcción de moléculas simples: agua, peróxido, metano, ácido sulfúrico
- 2.6 Visualizadores moleculares: Molden, Molekel, Avogadro, Chemcraft, etc.
- 2.7 Concepto de simetría

Referencias a fuentes de información

- DannFrenkel, BerendSmit. UNDERSTANDING MOLECULAR SIMULATION. Academic Press, SanDiego, (2015) 1ª Ed.
- Cristopher J. Cramer. ESSENTIALS OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY. Wiley (2014) 2ª. Ed

Referencias a fuentes de información complementarias

- Donald A. McQuarrie. QUANTUM CHEMISTRY. University Science Books, Sausalito, California (2013) 3a Ed.
- Alan Hinchliffe. MOLECULAR MODELLING FOR BEGINNERS. Wiley (2014) 2ª. Ed.
- Andrew R. Leach. MOLECULAR MODELLING, Prentice Hall (2015) 2ª. Ed.

[Handwritten signature]

[Handwritten scribble]

José Benito Delgado U.

UNIDAD 3 SOLUCIONES APROXIMADAS

OBJETIVO: El alumno aprenderá las bases que gobiernan la mecánica cuántica así como su implementación en las diferentes teorías del modelado molecular

- 3.1 Métodos de Cálculo
 - 3.1.1 Ab initio
 - 3.1.2 Semiempíricos
 - 3.1.3 DFT
 - 3.1.4 Mecánica Molecular
 - 3.1.5 Dinámica Molecular
- 3.2 Conjuntos de base
- 3.3 Niveles de Teoría

Referencias a fuentes de información

- DannFrenkel, BerendSmit. UNDERSTANDING MOLECULAR SIMULATION. Academic Press, SanDiego, (2015) 1ª Ed.
- Cristopher J. Cramer. ESSENTIALS OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY. Wiley (2014) 2ª. Ed

Referencias a fuentes de información complementarias

- Donald A. McQuarrie. QUANTUM CHEMISTRY. University Science Books, Sausalito, California (2013) 3a Ed.
- Alan Hinchliffe. MOLECULAR MODELLING FOR BEGINNERS. Wiley (2014) 2ª. Ed.

D.M.

[Handwritten signature]

[Handwritten scribble]

[Handwritten symbol]

Carajal Rojas Bro.

Centro Universitario de Tonalá
Licenciatura en

- Andrew R. Leach. MOLECULAR MODELLING, Prentice Hall (2015) 2ª. Ed.

UNIDAD 4 SIMULACIÓN MOLECULAR

OBJETIVO: El alumno aprenderá las bases para realizar cálculos de química computacional, desarrollará archivos de entrada para software especializado donde se calculen propiedades importantes de algunos sistemas moleculares. Entenderá los diferentes tipos de cálculo que se pueden hacer dentro del curso.

- 4.1 Software para simulación molecular
- 4.2 Construcción de archivos de entrada
- 4.3 Optimización de la geometría
- 4.4 Superficie de energía potencial
- 4.5 Cálculo de energía de un solo punto
- 4.6 Cálculo de Frecuencias

Referencias a fuentes de información

- DannFrenkel, BerendSmit. UNDERSTANDING MOLECULAR SIMULATION. Academic Press, SanDiego, (2015) 1ª Ed.
- Cristopher J. Cramer. ESSENTIALS OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY. Wiley (2014) 2ª. Ed

Referencias a fuentes de información complementarias

- Donald A. McQuarrie. QUANTUM CHEMISTRY. University Science Books, Sausalito, California (2013) 3a Ed.
- Alan Hinchliffe. MOLECULAR MODELLING FOR BEGINNERS. Wiley (2014) 2ª. Ed.
- Andrew R. Leach. MOLECULAR MODELLING, Prentice Hall (2015) 2ª. Ed.

UNIDAD 5 PROPIEDADES MOLECULARES

OBJETIVO: El alumno será capaz de predecir e interpretar los archivos de salida que arrojen los diferentes software usados dentro del área de la simulación molecular, por lo que podrá obtener información importante de las propiedades fisicoquímicas de la materia.

- 5.1 Densidad electrónica
- 5.2 Potencial electrostático
- 5.3 Momento dipolar
- 5.4 Potencial químico
- 5.5 Potencial de Ionización
- 5.6 Afinidad Electrónica
- 5.7 Análisis de población
- 5.8 Orbitales Moleculares
- 5.9 Análisis Vibracional

Referencias a fuentes de información

- DannFrenkel, BerendSmit. UNDERSTANDING MOLECULAR SIMULATION. Academic Press, SanDiego, (2015) 1ª Ed.
- Cristopher J. Cramer. ESSENTIALS OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY. Wiley (2014) 2ª. Ed

Referencias a fuentes de información complementarias

- Donald A. McQuarrie. QUANTUM CHEMISTRY. University Science Books, Sausalito, California (2013) 3a Ed.
- Alan Hinchliffe. MOLECULAR MODELLING FOR BEGINNERS. Wiley (2014) 2ª. Ed.
- Andrew R. Leach. MOLECULAR MODELLING, Prentice Hall (2015) 2ª. Ed.

Carlos Hernández

José Benito Relys U.

#

Carra Reyes

D.N.

Centro Universitario de Tonalá
Licenciatura en

Actividades de aprendizaje
Uso de la computadora para el modelado de sistemas computacionales, investigación sobre temas de modelado molecular, realización de un proyecto final.
Material y ambiente del aprendizaje
Computadoras de alto desempeño, Sistema operativo Linux, Software especializado de Química Computacional

Evaluación del aprendizaje	
Criterio de evaluación	Porcentaje
Prácticas de laboratorio computacional	30
Exámenes	20
Tareas	30
Proyecto	20

Carlos Mena

Participantes en la elaboración del programa		
Código	Nombre completo	Fecha de elaboración del programa
2948197	Gregorio Guzmán Ramírez	01 de marzo de 2018

Aprobó y revisó la academia de:	Fecha de aprobación	Fecha de próxima revisión
FISICOQUIMICA	05 de marzo de 2018	Agosto 2018

David Moreno

Arturo Estrada Vargas

Carlos Mena
Código 2948197
Martín del Campo
MHA

José Benito Pelayo V.

Nancy Pérez Peralta
2952792

Capul Rawosco.
2951399.