



DIRECTORIO

Mtro. Aurelio Nuño Mayer

Secretario de Educación Pública

Mtro. Efrén Rojas Dávila

Subsecretario de Educación Superior

Ing. Héctor Arreola Soria

Coordinador General de Universidades Tecnológicas y Politécnicas



PÁGINA LEGAL

Participantes

Dr. Juan Radilla Chávez

M. en C. Raúl García Cruz



Primera Edición: 2015

DR © 2015 Coordinación General de Universidades Tecnológicas y
Politécnicas.

Número de registro:

México, D.F.

ISBN-----

ÍNDICE

<u>INTRODUCCIÓN.....</u>	<u>6</u>
PROGRAMA DE ESTUDIOS	7
FICHA TÉCNICA.....	8
DESARROLLO DE PRÁCTICAS	9
DESARROLLO DEL PROYECTO DE INVESTIGACIÓN	16
<u>INSTRUMENTOS DE EVALUACIÓN</u>	
RÚBRICA DE REGISTRO DE BITÁCORA DE LABORATORIO COMPUTACIONAL....	21
RÚBRICA DE REPORTE DE PRÁCTICA DE LABORATORIO	22
RÚBRICA DE REPORTE DE PROYECTO DE INVESTIGACIÓN	23
EVALUACIÓN DEL CURSO	24
<u>GLOSARIO</u>	<u>25</u>
BIBLIOGRAFÍA	26

INTRODUCCIÓN

El ingeniero en nanotecnología tiene una sólida formación en las ciencias básicas, particularmente en química, que hoy en día es beneficiada en gran medida con los aportes proporcionados por la química computacional, herramienta imprescindible cuando en el estudio de problemas químicos es requerida la interpretación y el conocimiento de los fenómenos a escala atómica y molecular.

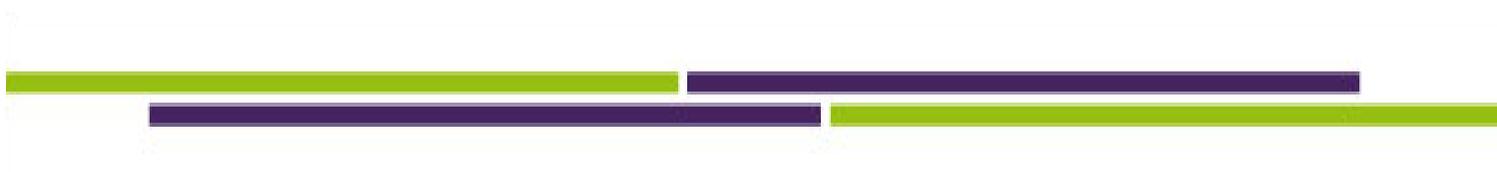
La madurez a que han arribado los códigos de química computacional en la actualidad permite que propiedades de sustancias o materiales calculadas compitan con las determinadas experimentalmente; también los estudios de química computacional orientan el experimento, facilita la interpretación de los resultados que se obtienen, optimizan el diseño de tales experimentos y aporta información de los materiales y procesos que no es accesible a los mismos, tales como orbitales moleculares y estructura electrónica detallada. En el método de química computacional la teoría, clásica o cuántica, es implementada computacionalmente mediante programas especializados que hacen posible la obtención de la estructura y propiedades de los materiales con el uso de cúmulos de computadoras basadas en unidades de procesamiento central (cpu) y unidades de procesamiento gráfico (gpu).

Desde el punto de vista teórico es deseable que el estudiante, para el mejor aprovechamiento del curso, tenga presente los conocimientos adquiridos en las diversas ramas de la química estudiadas (inorgánica, orgánica, fisicoquímica, bioquímica), así como física moderna, física de estado sólido, cálculo, ecuaciones diferenciales y métodos numéricos. Desde el punto de vista práctico el curso de química computacional se agiliza enormemente si el estudiante posee habilidades en el uso del sistema operativo Linux y programación elemental en el lenguaje C.

El contenido del curso está dividido en cinco unidades. La primera contiene la Introducción a la química computacional, la segunda abarca los métodos basados en la física clásica, como son la mecánica y dinámica moleculares, en tanto las siguientes tres unidades se refieren a métodos cuánticos para calcular la estructura electrónica de sistemas químicos, los cuales son Hartree-Fock, Teoría de Perturbaciones y Teoría de Funcionales de la Densidad. El 50 % del tiempo destinado al curso es empleado en la realización de prácticas de laboratorio de química computacional, empleando programas de visualización molecular, de cálculos de mecánica molecular y de estructura electrónica, en las que la teoría es corroborada con cálculos computacionales. También a lo largo del cuatrimestre se desarrolla un proyecto de investigación en química computacional en el que el estudiante



realiza una búsqueda bibliográfica, ubica la metodología de la investigación y la usa para obtener resultados, que analiza, discute y comunica mediante un reporte final de proyecto. El curso de Química Computacional es requisito indispensable para acceder al curso de Simulación de Superficies impartido en el siguiente cuatrimestre.



PROGRAMA DE ESTUDIOS





FICHA TÉCNICA
NOMBRE DE LA ASIGNATURA

Nombre:	QUÍMICA COMPUTACIONAL
Clave:	QUC-ES
Justificación:	El alumno será capaz de investigar la estructura y propiedades de materiales y sustancias a través de métodos computacionales basados
Objetivo:	Para predecir la estructura y propiedades de nuevos materiales, así como su comportamiento bajo condiciones físicas y químicas diversas.
Habilidades:	Comunicar efectivamente; Saber trabajar en equipo; Ser responsable en la inspección; Conocer las herramientas básicas del control de calidad; Conocer técnicas de muestreo.
Competencias genéricas a desarrollar:	Capacidad de abstracción, análisis y síntesis; Capacidad de aplicar los conocimientos en la práctica; Capacidad de comunicación oral y escrita.

Capacidades a desarrollar en la asignatura	Competencias a las que contribuye la asignatura
Seleccionar las técnicas para la nanoestructuración y síntesis de nanomateriales, empleando los resultados de la evaluación de la eficacia de producción para asegurar que el nanoproducto cumpla con las especificaciones técnicas.	<p>Determinar los procedimientos de modificación y/o síntesis de nanomateriales y nanodispositivos, empleando la especificación técnica correspondiente para producirlos sistemáticamente.</p> <p>Establecer los métodos de aplicación de nanomateriales empleando simulación computacional y pruebas experimentales para solucionar los problemas en diferentes áreas.</p>

Estimación de tiempo (horas) necesario para transmitir el aprendizaje al alumno, por Unidad de Aprendizaje:	Unidades de aprendizaje	HORAS TEORÍA		HORAS PRÁCTICA	
		presencial	No presencial	presencial	No Presencial
	I	10	3	5	3
	II	10	3	5	3

	III	10	3	5	3
	IV	10	3	5	3
	V	10	3	5	3
Total de horas por cuatrimestre:	105				
Total de horas por semana:	7				
Créditos:	6				



DESARROLLO DE LA PRÁCTICA O PROYECTO

Nombre de la asignatura:	Química Computacional		
Nombre de la Unidad de Aprendizaje:	1.- Introducción a la química computacional		
Nombre de la práctica o proyecto:	Introducción al sistema operativo Linux y sus editores de texto		
Número:	1	Duración (horas) :	3
Resultado de aprendizaje:	Aplica conocimientos básicos de Linux editar archivos de texto necesarios para un cálculo de química computacional y establecer conexión remota con servidores de supercómputo.		
Requerimientos (Material o equipo):	Sistema operativo Linux, computadoras, acceso a servidor remoto.		
<p>Actividades a desarrollar en la práctica: Definir en prosa las actividades a desarrollar en cada etapa.</p> <ul style="list-style-type: none"> ✓ Utiliza comandos básicos Linux para leer, editar y manipular archivos de texto. ✓ Establece conexión remota con servidores de supercomputadora. 			

Evidencias a las que contribuye el desarrollo de la práctica:

Bitácora de laboratorio
Reporte de práctica de laboratorio



Subsistema de
**Universidades
Politécnicas**

DESARROLLO DE LA PRÁCTICA O PROYECTO

Nombre de la asignatura:	Química Computacional		
Nombre de la Unidad de Aprendizaje:	1.- Introducción a la química computacional		
Nombre de la práctica o proyecto:	Construcción y visualización de geometrías iniciales		
Número:	2	Duración (horas) :	3
Resultado de aprendizaje:	A partir de la fórmula de una molécula, utilizando programas para construir y visualizar moléculas, obtiene su geometría inicial.		
Requerimientos (Material o equipo):	Computadora personal, sistema operativo Linux, Gamess (programa de química computacional), McMolPlt (programa de visualización molecular), conexión a Internet.		
Actividades a desarrollar en la práctica: Definir en prosa las actividades a desarrollar en cada etapa.			

- 
- ✓ Construye una molécula utilizando un constructor y visualizador molecular.
 - ✓ Obtiene el archivo de coordenadas atómicas de una molécula.

Evidencias a las que contribuye el desarrollo de la práctica:

Bitácora de laboratorio
Reporte de práctica de laboratorio

DESARROLLO DE LA PRÁCTICA O PROYECTO

Nombre de la asignatura:	Química Computacional		
Nombre de la Unidad de Aprendizaje:	2.- Métodos de mecánica molecular		
Nombre de la práctica o proyecto:	Análisis conformacional del ácido cólico		
Número:	3	Duración (horas) :	3
Resultado de aprendizaje:	Utilizando programas de mecánica molecular realiza el estudio conformacional de una molécula para obtener la geometría de equilibrio.		
Requerimientos (Material o equipo):	Computadora personal, sistema operativo Linux, Molecular Operating Environment (MOE, programa de química computacional), McMoIPIt (programa de visualización molecular), conexión a Internet.		
<p>Actividades a desarrollar en la práctica: Definir en prosa las actividades a desarrollar en cada etapa.</p> <ul style="list-style-type: none"> ✓ Obtiene la geometría inicial de una molécula con un visualizador molecular ✓ Aplica programas de mecánica molecular para obtener la geometría del confórmero más estable 			
<p>Evidencias a las que contribuye el desarrollo de la práctica:</p> <p>Bitácora de laboratorio Reporte de práctica de laboratorio</p>			

DESARROLLO DE LA PRÁCTICA O PROYECTO

Nombre de la asignatura:	Química Computacional		
Nombre de la Unidad de Aprendizaje:	2.- Métodos de mecánica molecular		
Nombre de la práctica o proyecto:	Dinámica molecular de un colectivo NVT de cien moléculas de agua para obtener su punto de ebullición.		
Número:	4	Duración (horas) :	3
Resultado de aprendizaje:	Calibra y efectúa una dinámica molecular clásica en un colectivo canónico para obtener propiedades físicas, como el punto de ebullición del agua.		
Requerimientos (Material o equipo):	Computadora personal, Windows (sistema operativo), Molecular Operating Environment (MOE, programa de química computacional), McMoIPIt (programa de visualización molecular), conexión a Internet.		
<p>Actividades a desarrollar en la práctica: Definir en prosa las actividades a desarrollar en cada etapa.</p> <ul style="list-style-type: none"> ✓ Prepara un colectivo canónico de 100 moléculas ✓ Ejecuta una dinámica molecular clásica ✓ Obtiene propiedades físicas, punto de ebullición, a partir de una dinámica molecular 			
<p>Evidencias a las que contribuye el desarrollo de la práctica:</p> <p>Bitácora de laboratorio Reporte de práctica de laboratorio</p>			



DESARROLLO DE LA PRÁCTICA O PROYECTO

Nombre de la asignatura:	Química Computacional		
Nombre de la Unidad de Aprendizaje:	3.- Estructura electrónica de moléculas		
Nombre de la práctica o proyecto:	Cálculo de la estructura electrónica de átomos y moléculas con el método de Hartree-Fock		
Número:	5	Duración (horas) :	3
Resultado de aprendizaje:	Aplica el método de Hartree-Fock para obtener la configuración electrónica de un átomo y la energía total, eigenvalores y geometría optimizada de una molécula.		
Requerimientos (Material o equipo):	Computadora personal, Windows (sistema operativo), Gamess (programa de química computacional), McMolPlt (programa de visualización molecular), conexión a Internet.		
<p>Actividades a desarrollar en la práctica: Definir en prosa las actividades a desarrollar en cada etapa.</p> <ul style="list-style-type: none"> ✓ Calcula la estructura electrónica de un átomo ✓ Calcula la estructura electrónica de una molécula ✓ Optimiza la geometría de una molécula 			
<p>Evidencias a las que contribuye el desarrollo de la práctica:</p> <p>Bitácora de laboratorio Reporte de práctica de laboratorio</p>			

DESARROLLO DE LA PRÁCTICA O PROYECTO

Nombre de la asignatura:	Química Computacional		
Nombre de la Unidad de Aprendizaje:	Teoría de perturbaciones		
Nombre de la práctica o proyecto:	4.- Optimización de geometría y cálculo de estados excitados de moléculas con MP2		
Número:	6	Duración (horas) :	3
Resultado de aprendizaje:	Obtiene los primeros estados excitados de la molécula de agua utilizando teoría de perturbaciones de Moller-Plesset de segundo orden (MP2)		
Requerimientos (Material o equipo):	Computadora personal, Windows (sistema operativo), Gamess (programa de química computacional), McMolPlt (programa de visualización molecular), conexión a Internet.		
Actividades a desarrollar en la práctica: Definir en prosa las actividades a desarrollar en cada etapa.			
<ul style="list-style-type: none"> ✓ Optimiza la geometría de una molécula con el método de Hartree-Fock ✓ Calcula los estados excitados de una molécula 			
Evidencias a las que contribuye el desarrollo de la práctica:			
<p>Bitácora de laboratorio</p> <p>Reporte de práctica de laboratorio</p>			

DESARROLLO DE LA PRÁCTICA O PROYECTO

Nombre de la asignatura:	Química Computacional		
Nombre de la Unidad de Aprendizaje:	5.- Teoría de Funcionales de la Densidad (DFT)		
Nombre de la práctica o proyecto:	Optimización de geometría y cálculo de propiedades químicas con DFT		
Número:	7	Duración (horas) :	3
Resultado de aprendizaje:	Utilizando DFT optimiza la geometría de una molécula y calcula frecuencias vibracionales y entalpías de reacción.		
Requerimientos (Material o equipo):	Computadora personal, Windows (sistema operativo), Gamess (programa de química computacional), McMolPlt (programa de visualización molecular), conexión a Internet.		
<p>Actividades a desarrollar en la práctica: Definir en prosa las actividades a desarrollar en cada etapa.</p> <ul style="list-style-type: none"> ✓ Optimiza la geometría de una molécula con DFT ✓ Obtiene el espectro IR de una molécula a partir de un cálculo de frecuencias vibracionales ✓ Calcula la entalpía de una reacción química 			
<p>Evidencias a las que contribuye el desarrollo de la práctica:</p> <p>Bitácora de laboratorio Reporte de práctica de laboratorio</p>			

DESARROLLO DEL PROYECTO DE INVESTIGACIÓN

Nombre de la asignatura:	Química Computacional		
Nombre de la Unidad de Aprendizaje:	I.- Introducción a la química computacional		
Nombre de la etapa del proyecto:	Planteamiento del problema y revisión bibliográfica		
Número:	1	Duración (semanas) :	3
Resultado de aprendizaje:	Se plantea el problema a investigar y se reporta el estado del arte del tema		
Requerimientos (Material o equipo):	Textos, manuales, bases de datos de revistas		
<p>Actividades a desarrollar en la práctica: Definir en prosa las actividades a desarrollar en cada etapa.</p> <ul style="list-style-type: none"> ✓ Describe el tema o problema a investigar ✓ Realiza búsqueda bibliográfica del tema 			
<p>Evidencias a las que contribuye el desarrollo de la práctica:</p> <p>Resumen de planteamiento del tema o problema a investigar Resumen de la búsqueda bibliográfica</p>			

DESARROLLO DEL PROYECTO DE INVESTIGACIÓN

Nombre de la asignatura:	Química Computacional		
Nombre de la Unidad de Aprendizaje:	II.- Métodos de mecánica molecular		
Nombre de la etapa del proyecto:	Metodología		
Número:	2	Duración (semanas) :	3
Resultado de aprendizaje:	Se describe metodología a usar en la investigación (métodos de química computacional, programas, calibración de cálculos, etc.).		
Requerimientos (Material o equipo):	Textos, manuales, bases de datos de revistas		
<p>Actividades a desarrollar en la práctica: Definir en prosa las actividades a desarrollar en cada etapa.</p> <ul style="list-style-type: none"> ✓ Describe el problema químico ✓ Describe el uso de los métodos y programas de química computacional a emplear 			
<p>Evidencias a las que contribuye el desarrollo de la práctica:</p> <p>Resumen de la metodología a usar en la investigación</p>			

DESARROLLO DEL PROYECTO DE INVESTIGACIÓN

Nombre de la asignatura:	Química Computacional		
Nombre de la Unidad de Aprendizaje:	III.- Estructura electrónica de moléculas		
Nombre de la etapa del proyecto:	Presentación de resultados		
Número:	3	Duración (semanas) :	3
Resultado de aprendizaje:	Se calculan y presentan los resultados de la investigación.		
Requerimientos (Material o equipo):	Computadora personal, Windows (sistema operativo), Gamess (programa de química computacional), McMolPlt (programa de visualización molecular), conexión a Internet.		
<p>Actividades a desarrollar en la práctica: Definir en prosa las actividades a desarrollar en cada etapa.</p> <ul style="list-style-type: none"> ✓ Se realizan los cálculos de química computacional ✓ Se presentan los resultados 			
Evidencias a las que contribuye el desarrollo de la práctica:			

Reporte de calibración de los cálculos
 Reporte de resultados de los cálculos



Subsistema de
**Universidades
 Politécnicas**

DESARROLLO DEL PROYECTO DE INVESTIGACIÓN

Nombre de la asignatura:	Química Computacional		
Nombre de la Unidad de Aprendizaje:	IV.- Teoría de perturbaciones		
Nombre de la etapa del proyecto:	Análisis de resultados y conclusiones		
Número:	4	Duración (semanas) :	3
Resultado de aprendizaje:	Se analizan y discuten resultados de los cálculos y se establecen conclusiones		
Requerimientos (Material o equipo):	Textos, manuales, bases de datos de revistas		
Actividades a desarrollar en la práctica: Definir en prosa las actividades a desarrollar en cada etapa. <ul style="list-style-type: none"> ✓ Se analizan y discuten los resultados ✓ Se elaboran conclusiones 			

Evidencias a las que contribuye el desarrollo de la práctica:

Reporte de la discusión de resultados

Resumen de las conclusiones



Subsistema de
**Universidades
Politécnicas**

DESARROLLO DEL PROYECTO DE INVESTIGACIÓN

Nombre de la asignatura:	Química Computacional		
Nombre de la Unidad de Aprendizaje:	V.- Teoría de funcionales de la densidad (DFT)		
Nombre de la etapa del proyecto:	Informe final y exposición del proyecto de investigación		
Número:	5	Duración (semanas) :	3
Resultado de aprendizaje:	Comunicación idónea de un proyecto de investigación		
Requerimientos (Material o equipo):	Textos, manuales, bases de datos de revistas		

Actividades a desarrollar en la práctica: Definir en prosa las actividades a desarrollar en cada etapa.

- ✓ Elabora informe final del proyecto
- ✓ Realiza exposición del proyecto ante el grupo

Evidencias a las que contribuye el desarrollo de la práctica:

Informe final del proyecto de investigación
 Diapositivas o resumen de la exposición del proyecto

 <small>Subsistema de</small> Universidades Politécnicas	INSTRUMENTOS DE EVALUACIÓN RÚBRICA DEL REGISTRO DE BITÁCORA DE LABORATORIO COMPUTACIONAL	
---	---	--

ELEMENTOS DE EVALUACIÓN	NIVEL DE DESEMPEÑO		
	EXCEPCIONAL 100 %	ACEPTABLE 80 %	NOVATO 50 %
Fecha y nombre de la práctica	Sí	Sí	Sí
Registro de datos	Sí	Sí	Incompleto
Registro de observaciones	Completo	Completo	Incompleto
Señalizaciones importantes (alertas,	Sí	No	No

aspectos clave, etc.)			
-----------------------	--	--	--

 Subsistema de Universidades Politécnicas	INSTRUMENTOS DE EVALUACIÓN RÚBRICA DEL REPORTE DE PRÁCTICA DE LABORATORIO	
---	--	--

ELEMENTOS DE EVALUACIÓN	NIVEL DE DESEMPEÑO		
	EXCEPCIONAL 100 %	ACEPTABLE 80 %	NOVATO 50 %
Objetivos	Sí	Sí	Sí
Introducción	Información completa del tema	Información completa del tema	Información parcial del tema
Metodología	La descripción metodológica es	La descripción metodológica es completa	La descripción metodológica no es completa ni clara

	completa y clara		
Presentación de resultados	Completa y clara, incluye tablas, gráficas y otros recursos	Completa	Incompleta, descriptiva
Análisis de resultados	Incluyen discusión química	No	No
Conclusiones	Sí	No	No



ELEMENTOS DE EVALUACIÓN	NIVEL DE DESEMPEÑO		
	EXCEPCIONAL 100 %	ACEPTABLE 80 %	NOVATO 50 %
Título y resumen	Sí	Sí	Sí
Introducción	Información completa del tema	Información completa del tema	Información parcial del tema
Metodología	La descripción metodológica es completa y clara	La descripción metodológica es completa	La descripción metodológica no es completa ni clara

Presentación de resultados	Completa y clara, incluye tablas, gráficas y otros recursos	Completa	Incompleta, descriptiva
Análisis de resultados	Incluyen discusión química	No	No
Conclusiones	Sí	No	No

 <p>Subsistema de Universidades Politécnicas</p>	INSTRUMENTOS DE EVALUACIÓN EVALUACIÓN DEL CURSO	
--	--	--

Cada una de las cinco unidades del curso es evaluada con los siguientes elementos:

Examen de conocimientos:

Hasta 4 puntos

Prácticas de laboratorio:

Hasta 2 puntos cada una, totalizando no más de 3 puntos por unidad

Proyecto de investigación:

Hasta 3 puntos en cada unidad



CALIFICACIÓN DE UNIDAD

Hasta 10 PUNTOS

La calificación mínima aprobatoria por unidad es 7 (SIETE).

La calificación final del curso se obtiene sumando las calificaciones de cada unidad y dividiendo entre 5. La calificación mínima aprobatoria del curso es: 7 (SIETE).

GLOSARIO

- 1. Química computacional:** Métodos computacionales basados en modelos de la mecánica molecular, aproximaciones semiempíricas y teorías de orbitales moleculares a primeros principios (*ab initio*) que permiten determinar la estructura y propiedades moleculares.
- 2. Mecánica molecular:** Aplica la mecánica clásica para modelar sistemas moleculares, considerados partículas con masa y carga enlazadas por resortes. La energía potencial de tales sistemas se obtiene a partir de campos de fuerza.
- 3. Dinámica molecular:** Método de simulación computacional del movimiento de N cuerpos basado en las leyes de Newton; los átomos y moléculas interactúan durante un período fijo de tiempo en el que las variables dinámicas evolucionan generando las trayectorias, en tanto que las fuerzas y la energía potencial son calculados empleando potenciales de interacción o campos de fuerza de mecánica molecular.
- 4. Campo de fuerza:** En el contexto de la mecánica molecular, es la ecuación de la energía potencial de una molécula en la que los componentes de la misma tienen expresiones explícitas.
- 5. Superficie de energía potencial:** Describe la energía de un sistema (conjunto de átomos) en términos de ciertos parámetros, tales como posiciones atómicas (geometrías).
- 6. Confórmero:** Cada una de las posibles geometrías espaciales que puede tener una molécula.
- 7. Método *ab initio*:** Cálculo cuántico a primeros principios, libre de parámetros.

BIBLIOGRAFÍA

Básica

1. Cuevas, G.; Cortés, F.; Introducción a la química computacional; Fondo de Cultura Económica, México 2003; 968-16-7105-8.
2. Levine, I. N.; Química cuántica; Pearson Educación S. A.; 2001; 84-205-3096-4.
3. Rappé, A. K. y Casewit, C. J.; Molecular Mechanics across Chemistry; University Science Books, Sausalito, CA, USA 1997; 0-935702-77-6.

Complementaria

1. Vega Luna, J. I. ; Salgado Guzmán, G.; Introducción al uso del UNIX; UAM Azcapotzalco; México, D. F. 2003; 970-31-0155-0.

Sitio Web