

### 1. Datos Generales de la asignatura

<b>Nombre de la asignatura:</b>	Introducción al Modelado por Computadora
<b>Clave de la asignatura:</b>	NAF-0911
<b>SATCA<sup>1</sup>:</b>	3-2-5
<b>Carrera:</b>	Ingeniería en Nanotecnología

### 2. Presentación

#### Caracterización de la asignatura

El modelado molecular es una tarea inherente al método científico que se imparte como fundamento en la educación moderna. De una manera particular, la Química Cuántica Computacional (QCC) ha tomado importancia como herramienta útil para estudiar el comportamiento de sistemas complejos (en especial cuando nos referimos al nanomundo de nuevos materiales). Se trata de simular, mediante métodos computacionales, los fenómenos fisicoquímicos de los sistemas interaccionantes en los diferentes procesos que ocurren en la naturaleza. Esta herramienta, es cada vez más variada y diversificada debido al “software” y “hardware” cada vez más potente en el mercado. Ejemplos de ello son la velocidad de procesamiento, el uso de computadoras paralelizables (en un rango de dos a mil procesadores) y otros más. Por ende, el modelado computacional es muy atractivo actualmente para la Química, la Física y la Ciencia de Materiales por su poder predictivo, y en otras áreas muy diversas.

Desde mediados del siglo XX y hasta la actualidad, se ha desarrollado y mejorado la capacidad de cálculo de los ordenadores, herramienta con la que es posible, mediante el programa adecuado, no sólo proponer nuevos experimentos en el laboratorio sino también realizar simulaciones y predicciones. El desarrollo de potentes métodos de cálculo que se ejecutan en súper-computadoras, supone que experimentos muy complejos y caros podrán simularse desde los primeros principios en un ordenador, incluyendo en el cálculo toda la información disponible. Estos son “experimentos virtuales” que cada vez reproducen con más precisión el comportamiento de la materia a escala nanométrica.

La asignatura propuesta contribuiría a utilizar y comprender que el uso de la QCC es más que una poderosa herramienta de trabajo y, sobre todo, que no requiere mucha inversión para poder obtener una buena aproximación de interés tanto químico como físico para el diseño de nuevos materiales. De esta manera, el alumno sería capaz de entender a nivel fundamental y complementar los fenómenos observados y los resultados experimentales, y, en algunos casos, le permitiría ir más allá de la información que se consigue en el laboratorio.

**Intención didáctica**

La asignatura expone una visión operativa de la aplicación de modelos computacionales a sistemas químicos y la determinación de propiedades moleculares y electrónicas como un complemento a las ciencias experimentales.

El temario consiste en cinco temas. En el primer tema el estudiante descubre qué se puede hacer con la química computacional, como se utiliza los resultados de la Química teórica para calcular las estructuras y las propiedades de moléculas.

En el segundo tema, se aborda los métodos de Química Cuántica basados en la resolución aproximada de la ecuación de Schrödinger. La ecuación de Schrödinger describe, entre otras cosas, el comportamiento de los núcleos y electrones en una molécula, importantes en los fenómenos físico-químico en general.

En el tercer tema, se analiza métodos de simulación que evitan los cálculos requeridos por la Mecánica Cuántica. La Mecánica molecular concibe a la molécula como una colección de esferas unidas por resortes y usan una expresión algebraica simple para la energía total de una molécula.

En el cuarto tema se caracteriza un sistema a través de la obtención de índices de reactividad química global y local como son, potencial químico, dureza, blandura, electronegatividad, electrofilicidad y la función de Fukui. Los índices globales están relacionados con la reactividad química de sistemas químicos en conjunto, mientras tanto que, los índices de reactividad local se relacionan al concepto de selectividad intrínseca de sus partes.

En el último tema se utiliza paquetes computacionales para desarrollar simulaciones que faciliten la comprensión de conceptos teóricos y experimentales y obtener información sobre diferentes propiedades.

Es recomendable que el profesor trabaje en el área de su profesión, esto lo mantendrá al tanto de los últimos acontecimientos en la misma. La experiencia y el conocimiento que el profesor exprese en sus clases son fundamentales para el desarrollo de los estudiantes.

Se debe planear una serie de actividades que favorezcan el aprendizaje y que propicien el logro de los objetivos planteados, de manera que éstas sean atractivas y que logren captar la atención y el interés de sus estudiantes de esta poderosa herramienta de trabajo; ya que además es de bajo costo y poder de predicción en el ambiente de interés tanto químico como físico, así como para el diseño de nuevos materiales. El objetivo final es que el alumno aproveche y asimile de los conocimientos básicos para su aplicación posterior el ambiente profesional. Es importante crear el interés que lleve a una construcción del aprendizaje por propia convicción del estudiante y no solo para pasar un examen.

### 3. Participantes en el diseño y seguimiento curricular del programa

Lugar y fecha de elaboración o revisión	Participantes	Evento
Instituto Tecnológico de Ciudad Juárez del 27 al 29 de Abril de 2009.	Representantes de los Institutos Tecnológicos de: Tijuana, Querétaro, Celaya, Saltillo, Ciudad Juárez, Superior de Irapuato, San Luis Potosí, Chihuahua.	Reunión Nacional de diseño e innovación curricular para el desarrollo de competencias profesionales de las carreras de Ingeniería en Nanotecnología e Ingeniería en Logística del SNEST.
Instituto Tecnológico de Puebla del 8 al 12 de Junio de 2009.	Representantes de los Institutos Tecnológicos de: Tijuana, Querétaro, Celaya, Saltillo, Ciudad Juárez, Superior de Irapuato, San Luis Potosí, Chihuahua.	Reunión de seguimiento de diseño e innovación curricular para el desarrollo de competencias profesionales de las carreras de Ing. en Nanotecnología, Gestión Empresarial, Logística, y asignaturas comunes del SNEST.
Instituto Tecnológico de Mazatlán del 23 al 27 de Noviembre de 2009.	Representantes de los Institutos Tecnológicos de: Tijuana, Querétaro, Ciudad Juárez, Superior de Irapuato, San Luis Potosí, Chihuahua.	Reunión de seguimiento de diseño e innovación curricular para el desarrollo de competencias profesionales de la carrera de Ing. en Nanotecnología, del SNEST.
Instituto Tecnológico de Villahermosa del 24 al 28 de Mayo de 2010.	Representantes de los Institutos Tecnológicos de: Tijuana, Querétaro, Superior de Irapuato, Chihuahua, Saltillo.	Reunión de consolidación de diseño e innovación curricular para el desarrollo de competencias profesionales de la carrera de Ing. en Nanotecnología, del SNEST.
Tecnológico Nacional de México, del 26 al 30 de agosto de 2013.	Representantes de los Institutos Tecnológicos de: Boca del Río y Mazatlán.	Reunión Nacional de Seguimiento Curricular de las carreras de Ingeniería en Nanotecnología, Ingeniería Petrolera, Ingeniería en Acuicultura, Ingeniería en Pesquerías, Ingeniería Naval y Gastronomía del SNIT.

#### 4. Competencia(s) a desarrollar

Competencia(s) específica(s) de la asignatura
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Predice las propiedades geométricas y electrónicas de materiales nanoestructurados a través del modelado computacional para optimizar tiempos de síntesis en laboratorio.</li> </ul>

#### 5. Competencias previas

<ul style="list-style-type: none"> <li>• Interpreta las propiedades físicas y químicas de las sustancias con base en los conceptos fundamentales de la estructura de los átomos, iones y moléculas y la forma en que interactúan entre sí para generar sustancias nuevas.</li> <li>• Plantea metodológicamente la solución de problemas susceptibles de ser computarizados a través del manejo de técnicas estructuradas de diseño y formulación de algoritmos, así como realizar la documentación de manera pertinente.</li> </ul>
---

#### 6. Temario

No.	Temas	Subtemas
1	Introducción	1.1 Química Teórica, Química Cuántica y Computacional (QTC). 1.2 Origen de la mecánica cuántica y computacional. 1.3 Importancia y aportaciones de la Química computacional a la ciencia
2	Métodos no-cuánticos incluidos en la Química Teórica y Computacional	2.1 Bases de la Mecánica clásica. 2.2 Mecánica clásica <i>versus</i> Mecánica cuántica. 2.3 Mecánica molecular. 2.4 Cargas puntuales atómicas 2.5 Fuerzas de repulsión 2.6 Modelo de Lennard-Jones 2.7 Ecuación de Buckingham. 2.8 Sistemas poliatómicos. 2.9 Campo de fuerza y tipos de campo de fuerza.
3	Métodos de Química Cuántica	3.1 Postulados de la mecánica cuántica. 3.2 Aproximación de Born-Oppenheimer. 3.3 Método de Hartree-Fock. 3.4 Funciones de base. 3.5 Espín electrónico. 3.6 Métodos semiempíricos. 3.7 Métodos post-Hartree-Fock. 3.8 Teoría de funcionales de la densidad (DFT). 3.9 Extensión de la teoría cuántica al estudio de superficies.

4	Modelación	4.1 Introducción. 4.2 Índices de reactividad química. 4.3 Obtención de resultados con significado químico.
5	Programas computacionales	5.1 Gaussian y Gaussview. 5.2 Accelrys. 5.3 Hyperchem 5.4 Comandos UNIX de uso frecuente. 5.5 Programas libres.

### 7. Actividades de aprendizaje de los temas

<b>1. Introducción</b>	
<b>Competencias</b>	<b>Actividades de aprendizaje</b>
<p><b>Específica(s):</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Discute el objetivo y posibilidades de la Química computacional, su relación con la Química cuántica y teórica y las aportaciones que se han realizado a las ciencias experimentales.</li> </ul> <p><b>Genéricas:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Capacidad de análisis y síntesis.</li> <li>• Solución de Problemas.</li> <li>• Habilidad para búsqueda de información.</li> <li>• Capacidad para trabajar en equipo.</li> <li>• Habilidad en el uso de tecnologías de información y comunicación.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Reconocer que la Química cuántica, Química teórica y Química computacional es la misma.</li> <li>• Investigar el desarrollo histórico de la Mecánica cuántica.</li> <li>• Discutir el significado e importancia de la constante de Planck.</li> <li>• Analizar el comportamiento de los microsistemas.</li> <li>• Interpretar el principio de incertidumbre de Heisenberg.</li> <li>• Discutir qué predicciones se pueden realizar mediante la Química computacional.</li> <li>• Debatar el impacto de la Química cuántica computacional en la sociedad moderna.</li> </ul>
<b>2. Métodos no-cuánticos incluidos en la Química Teórica y Computacional</b>	
<b>Competencias</b>	<b>Actividades de aprendizaje</b>
<p><b>Específica(s):</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Aplica los métodos de simulación de mecánica molecular para obtener energías asociadas a las posibles conformaciones estructurales.</li> </ul> <p><b>Genéricas:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Capacidad de análisis y síntesis.</li> <li>• Solución de Problemas.</li> <li>• Habilidad para búsqueda de información.</li> <li>• Capacidad para trabajar en equipo.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Revisar las bases de la mecánica clásica.</li> <li>• Realizar un cuadro comparativo de la mecánica clásica y mecánica cuántica.</li> <li>• Investigar el modelo de Lennard-Jones y el teorema de Buckingham.</li> <li>• Investigar el concepto de campos de fuerza y tipos de campo de fuerza.</li> <li>• Discutir las distintas filosofías de parametrización para la generación de campos de fuerza.</li> <li>• Aplicar la metodología de campos de fuerza en la búsqueda de conformeros.</li> </ul>

<ul style="list-style-type: none"> <li>Habilidad en el uso de tecnologías de información y comunicación.</li> <li>Capacidad de aplicar los conocimientos en la práctica.</li> <li>Comunicación oral y escrita.</li> </ul>	
<b>3. Métodos de Química Cuántica</b>	
<b>Competencias</b>	<b>Actividades de aprendizaje</b>
<p>Específica(s):</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Conoce los principales métodos de química cuántica basados en la resolución aproximada de la ecuación de Schrödinger.</li> <li>Valora la aplicación de la mecánica cuántica en la obtención de propiedades enfocadas a la distribución electrónica.</li> </ul> <p>Genéricas:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Capacidad de análisis y síntesis.</li> <li>Solución de Problemas.</li> <li>Habilidad para búsqueda de información.</li> <li>Capacidad para trabajar en equipo.</li> <li>Habilidad en el uso de tecnologías de información y comunicación.</li> <li>Capacidad de aplicar los conocimientos en la práctica.</li> <li>Comunicación oral y escrita.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Investigar los postulados de la mecánica cuántica.</li> <li>Revisar la ecuación de Schrödinger.</li> <li>Definir el concepto base y funciones base que existen.</li> <li>Redactar las ventajas y limitaciones de los principales métodos semiempíricos.</li> <li>Analizar los fundamentos de la teoría del funcional de la densidad.</li> <li>Identificar los principales métodos que incorporan la correlación electrónica en el cálculo.</li> <li>Interpretar el concepto de superficie de energía potencial.</li> <li>Relacionar el tamaño de un sistema con el costo computacional.</li> </ul>
<b>4. Modelación</b>	
<b>Competencias</b>	<b>Actividades de aprendizaje</b>
<p>Específica(s):</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Utiliza los métodos computacionales en la representación de la estructura y reactividad de las moléculas.</li> </ul> <p>Genéricas:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Capacidad de análisis y síntesis.</li> <li>Habilidad para búsqueda de información.</li> <li>Habilidad en el uso de tecnologías de información y comunicación.</li> <li>Capacidad de aplicar los conocimientos en la práctica.</li> <li>Comunicación oral y escrita.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>De acuerdo a los programas disponibles, iniciar con el modelado molecular y aprender el uso de las herramientas de trabajo.</li> <li>Representar gráficamente la estructura geométrica de las moléculas.</li> <li>Predecir la estructura y estabilidad de los sistemas químicos.</li> <li>Estudiar la dependencia de la energía con los ángulos de torsión.</li> <li>Relacionar la energía de una molécula con su estructura.</li> <li>Determinar los átomos más reactivos en una molécula mediante un análisis de distribución de cargas.</li> </ul>



	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Calcular los índices de reactividad química global y local de un sistema sencillo (dureza, blandura, potencial químico, electrofilicidad, función de Fukui).</li> </ul>
<b>5. Programas computacionales</b>	
<b>Competencias</b>	<b>Actividades de aprendizaje</b>
<p>Específica(s):</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Utiliza programas computacionales para predecir las propiedades de sistemas moleculares bajo una variedad de condiciones.</li> </ul> <p>Genéricas:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Capacidad de análisis y síntesis.</li> <li>• Habilidad para búsqueda de información.</li> <li>• Habilidad en el uso de tecnologías de información y comunicación.</li> <li>• Capacidad de aplicar los conocimientos en la práctica.</li> <li>• Comunicación oral y escrita.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Utilizar los diferentes programas de química computacional para modelado molecular, optimización de geometrías y cálculos de descriptores químicos de ambiente amigable bajo plataforma Windows.</li> <li>• Calcular magnitudes moleculares y de agrupaciones macroscópicas de estas mediante espectroscopia IR, UV y NMR.</li> <li>• Distinguir los comandos básicos del sistema operativo UNIX utilizados en paquetes computacionales.</li> </ul>

**8. Práctica(s)**

<ul style="list-style-type: none"> <li>• Descripción de programas computacionales y ejemplos sencillos de aplicación.</li> <li>• Cálculo de propiedades moleculares para una molécula sencilla.</li> <li>• Análisis conformacional.</li> <li>• Espectroscopía UV. Estudio de las transiciones electrónicas.</li> <li>• Espectroscopía IR y RMN.</li> </ul>
--

**9. Proyecto de asignatura**

<p>El objetivo del proyecto que planteé el docente que imparta esta asignatura, es demostrar el desarrollo y alcance de la(s) competencia(s) de la asignatura, considerando las siguientes fases:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Fundamentación:</b> marco referencial (teórico, conceptual, contextual, legal) en el cual se fundamenta el proyecto de acuerdo con un diagnóstico realizado, mismo que permite a los estudiantes lograr la comprensión de la realidad o situación objeto de estudio para definir un proceso de intervención o hacer el diseño de un modelo.</li> <li>• <b>Planeación:</b> con base en el diagnóstico en esta fase se realiza el diseño del proyecto por parte de los estudiantes con asesoría del docente; implica planificar un proceso: de intervención empresarial, social o comunitario, el diseño de un modelo, entre otros, según el tipo de proyecto, las actividades a realizar los recursos requeridos y el cronograma de trabajo.</li> </ul>
--

- **Ejecución:** consiste en el desarrollo de la planeación del proyecto realizada por parte de los estudiantes con asesoría del docente, es decir en la intervención (social, empresarial), o construcción del modelo propuesto según el tipo de proyecto, es la fase de mayor duración que implica el desempeño de las competencias genéricas y específicas a desarrollar.
- **Evaluación:** es la fase final que aplica un juicio de valor en el contexto laboral-profesión, social e investigativo, ésta se debe realizar a través del reconocimiento de logros y aspectos a mejorar se estará promoviendo el concepto de “evaluación para la mejora continua”, la metacognición, el desarrollo del pensamiento crítico y reflexivo en los estudiantes.

### 10. Evaluación por competencias

- Para evaluar las actividades de aprendizaje se recomienda solicitar: mapas conceptuales, reportes de prácticas, estudios de casos, exposiciones en clase, ensayos, problemarios, reportes de visitas, portafolio de evidencias y cuestionarios.
- Para verificar el nivel del logro de las competencias del estudiante se recomienda utilizar: listas de cotejo, listas de verificación, matrices de valoración, guías de observación, coevaluación y autoevaluación.

### 11. Fuentes de información

1. Lewars, E. *Computational Chemistry: Introduction of the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics*. Kluwer Academic Publishers, 2003.
2. Frenkel, D.; Smit, B. *Understanding molecular simulation*. Academic Press, 2ª edición, 2001.
3. Leach, A. R. *Molecular modeling*. Longman, 2ª edición, 2001.
4. Cramer, C. J. *Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models*. John Wiley & Sons, 2002.
5. Young, D. *Computational Chemistry: A practical guide for applying techniques to real world problems*. Wiley-Interscience, 2001.
6. Jensen, F. *Introduction to computational chemistry*. Wiley, 1999.
7. Schlick, T. *Molecular modeling and simulation: An interdisciplinary guide*. Springer, 2002.
8. Hinchliffe, A. *Molecular Modelling for Beginners*. Wiley, 2003.
9. R. Dronskowski. *Computational Chemistry of Solid State Materials*. Wiley-VCH, 2005.