

| UNIVERSIDAD DE GUANAJUATO | | | | | | | | | | |
|--|--|---|---|--------------|---|------------------|-----------------------|-----------|-----------|--|
| NOMBRE DE LA ENTIDAD: | | CAMPUS LEÓN; DIVISIÓN DE CIENCIAS E INGENIERÍAS | | | | | | | | |
| NOMBRE DEL PROGRAMA EDUCATIVO: | | Licenciatura en Ingeniería Química | | | | | | | | |
| NOMBRE DE LA MATERIA: | | Simulación Molecular y Química Computacional | | | | | CLAVE: | | POSMQC-08 | |
| FECHA DE ELABORACIÓN: | | 13 de junio, 2011 | | | | | HORAS/SEMANA/SEMESTRE | | | |
| FECHA DE ACTUALIZACIÓN: | | | | | | | | | | |
| | | Susana Figueroa Gerstenmaier | | | | | | | | |
| PRERREQUISITOS: | | | | | | TEORÍA: | | 2 | | |
| CURSADA Y APROBADA: | | Ninguno | | | | PRÁCTICA: | | 2 | | |
| CURSADA: | | Ninguna | | | | CRÉDITOS: | | 6 | | |
| CARACTERIZACIÓN DE LA MATERIA | | | | | | | | | | |
| POR EL TIPO DE CONOCIMIENTO: | | DISCIPLINARIA | X | FORMATIVA | | METODOLÓGICA | | | | |
| POR LA DIMENSIÓN DEL CONOCIMIENTO: | | ÁREA BÁSICA | | ÁREA GENERAL | | ÁREA PROFESIONAL | X | | | |
| POR LA MODALIDAD DE ABORDAR EL CONOCIMIENTO: | | CURSO | X | TALLER | | LABORATORIO | | SEMINARIO | | |
| POR EL CARÁCTER DE LA MATERIA: | | OBLIGATORIA | | RECURSABLE | | OPTATIVA | X | SELECTIVA | | |
| ES PARTE DE UN TRONCO COMÚN O MATERIAS COMUNES: | | SÍ | | NO | X | | | | | |
| COMPETENCIA (S) GENERAL(ES) DE LA MATERIA: | | | | | | | | | | |
| <ul style="list-style-type: none"> • Aplicar los conceptos, definiciones y herramientas adquiridos durante el curso a la solución numérica y computacional de problemas planteados en el marco de la Termodinámica Estadística y la Química Cuántica. • Aprender a calcular propiedades termodinámicas, dinámicas y estructurales de sistemas macroscópicos a partir de sus contribuciones microscópicas. • Aprender el uso de la Química Computacional para predecir reactividad química, propiedades espectroscópicas, y obtener parámetros que contribuyen a la comprensión del comportamiento fisicoquímico de las moléculas. • Aprender el uso de la Simulación Molecular como una poderosa herramienta para contrastar soluciones analíticas (teoría), resolver problemas que no tienen solución analítica y substituir datos experimentales cuando no se tienen o son difíciles de adquirir. Explicar y predecir fenómenos fisicoquímicos con los conocimientos adquiridos. | | | | | | | | | | |

CONTRIBUCIÓN DE LA MATERIA AL LOGRO DEL PERFIL POR COMPETENCIAS.

1. Demostrar una comprensión profunda de los conceptos y principios fundamentales de física y química (pensando que las matemáticas son una herramienta).
12. Realizar investigación aplicada (innovación de tecnología y uso de tecnologías emergentes).
14. Plantear, analizar y resolver problemas físicos, químicos y fisicoquímicos, tanto teóricos como experimentales, mediante la utilización de método analíticos, experimentales o numéricos.
15. Aplicar el conocimiento teórico de la Física, Química y Fisicoquímica en la realización de proyectos de ingeniería.
16. Utilizar y elaborar programas o sistemas de computación para el procesamiento de información, cálculo numérico, simulación de procesos o control de experimentos.
19. Demostrar hábitos de trabajo necesarios para el desarrollo de la profesión tales como el trabajo en equipo, el rigor científico, el auto aprendizaje y la persistencia y creatividad.

PRESENTACIÓN DE LA MATERIA

El objeto de estudio de este curso es un conjunto de técnicas para calcular propiedades de sistemas termodinámicos, y en particular de la materia en fase fluida. Por otra parte, combina el uso de cálculos de Química Computacional para predecir la estructura y propiedades de moléculas.

Aplicaciones: Finalmente el estudiante implementará su propio código (a elegir, Monte Carlo o Dinámica Molecular) para modelar algún problema simple, por ejemplo, el cálculo de algún punto de estado termodinámico de un fluido Lennard-Jones y utilizando la Química Computacional, predecir la estructura y algunas propiedades de una molécula particular usando alguno de los software diseñados para este propósito.

Esta última parte se espera que se desarrolle extra clase.

La metodología de enseñanza que se sugiere, para un mejor aprovechamiento de la materia, es la siguiente:

En las clases de teoría se expondrán los conceptos y las técnicas descritos arriba. En las clases de práctica (o taller) se supervisará que el estudiante implemente lo aprendido. Ésta es una asignatura con una importante componente de orden práctico; la idea es aprender haciendo. Si no se hace de este modo, el estudiante perderá la motivación y probablemente olvidará lo aprendido.

RELACIÓN CON OTRAS MATERIAS DEL PLAN DE ESTUDIOS

Para facilitar el aprendizaje de esta materia, se recomienda fuertemente haber cursado las asignaturas de Termodinámica y Termodinámica Química, Mecánica Estadística, química cuántica y Lenguaje de Programación previamente. Esta asignatura proveerá los insumos para describir tanto cualitativa como cuantitativamente fenómenos observados en moléculas y sistemas termodinámicos simples, y su extensión a sistemas más complejos en cursos subsecuentes de posgrado de diversas áreas como Física, Química, Biología, Ingeniería Química, Ciencia de Materiales y Nanotecnología por citar solo algunas de las áreas de aplicación.

| NOMBRE DE LA UNIDAD TEMÁTICA/BLOQUE TEMÁTICO: | Introducción | | TIEMPO ESTIMADO PARA DESARROLLAR LA UNIDAD TEMÁTICA: | 6 horas (teoría y práctica) | |
|---|---|---|---|---|-----------------------------|
| COMPETENCIAS A DESARROLLAR | SABERES | | | EVIDENCIAS DE DESEMPEÑO | |
| | CONOCIMIENTOS | HABILIDADES | ACTITUDES | DIRECTA | POR PRODUCTO |
| Conocer, comprender y adquirir los conceptos básicos y el lenguaje del modelado y de la simulación molecular. | <p>Modelado Potenciales empíricos y ab initio</p> <p>Tratamiento de fuerzas de largo alcance</p> <p>Correcciones cuánticas</p> <p>Repaso de Termodinámica Estadística:</p> <p>Colectivos, Propiedades promedio</p> <p>Fluctuaciones</p> <p>Calculo de propiedades estructurales y de transporte</p> | Manejar los conceptos básicos del modelado y la simulación molecular. | <p>El fortalecimiento de correctos hábitos de estudio y de análisis.</p> <p>La adquisición e integración de conocimientos.</p> <p>El desarrollo de una perspectiva racional del mundo en que se vive.</p> | <p>Ejercicios en clase</p> <p>Participación</p> <p>Asistencia</p> | <p>Tareas</p> <p>Examen</p> |

| NOMBRE DE LA UNIDAD TEMÁTICA/BLOQUE TEMÁTICO: | Técnicas de simulación | | TIEMPO ESTIMADO PARA DESARROLLAR LA UNIDAD TEMÁTICA: | 6 horas (teoría y práctica) | |
|--|------------------------------------|--|---|---|-----------------------------|
| COMPETENCIAS A DESARROLLAR | SABERES | | | EVIDENCIAS DE DESEMPEÑO | |
| | CONOCIMIENTOS | HABILIDADES | ACTITUDES | DIRECTA | POR PRODUCTO |
| Adquirir y comprender los conceptos básicos para realizar una simulación | Condiciones periódicas de contorno | Manejar los conceptos básicos para construir un código de simulación | El fortalecimiento de correctos hábitos de estudio y de análisis. | <p>Ejercicios en clase</p> <p>Participación</p> | <p>Tareas</p> <p>Examen</p> |

| | | | | | |
|------------|--|------------|---|------------|--|
| molecular. | Condiciones de mínima imagen Generación de configuraciones Unidades reducidas Calculo de energía y otras propiedades termodinámicas Visualización de configuraciones | molecular. | La adquisición e integración de conocimientos. El desarrollo de una perspectiva racional del mundo en que se vive. | Asistencia | |
|------------|--|------------|---|------------|--|

| NOMBRE DE LA UNIDAD TEMÁTICA/BLOQUE TEMÁTICO: | Método Monte Carlo (MC) | | TIEMPO ESTIMADO PARA DESARROLLAR LA UNIDAD TEMÁTICA: | 6 horas (teoría y práctica) | |
|---|---|--|--|--|----------------------|
| COMPETENCIAS A DESARROLLAR | SABERES | | | EVIDENCIAS DE DESEMPEÑO | |
| | CONOCIMIENTOS | HABILIDADES | ACTITUDES | DIRECTA | POR PRODUCTO |
| Conocer y comprender como funciona el método Monte Carlo. | Muestreo de importancia Balance detallado Algoritmo general de un código Monte Carlo (NVT) Pasos básicos MC (traslación y orientación) Monte Carlo isotérmico-isobárico Calculo de presión (virial) y de potencial químico (Widom) | Manejar los conceptos básicos del método MC, y el algoritmo para construir un programa MC. | El fortalecimiento de correctos hábitos de estudio y de análisis. La adquisición e integración de conocimientos. El desarrollo de una perspectiva racional del mundo en que se vive. | Ejercicios en clase Participación Asistencia | Tareas Examen |

| | | | | | |
|---|---|--|--|--|----------------------|
| NOMBRE DE LA UNIDAD TEMÁTICA/BLOQUE TEMÁTICO: | Dinámica Molecular | | TIEMPO ESTIMADO PARA DESARROLLAR LA UNIDAD TEMÁTICA: | 6 horas (teoría y práctica) | |
| COMPETENCIAS A DESARROLLAR | SABERES | | | EVIDENCIAS DE DESEMPEÑO | |
| | CONOCIMIENTOS | HABILIDADES | ACTITUDES | DIRECTA | POR PRODUCTO |
| Conocer y comprender como funciona el método de Dinámica Molecular. | Calculo de fuerzas Integración de las ecuaciones de movimiento Algoritmo general de un código de DM (NVT) Método de diferencias finitas (Verlet) | Manejar los conceptos básicos del método de DM, y el algoritmo para construir un programa de DM (NVT). | El fortalecimiento de correctos hábitos de estudio y de análisis. La adquisición e integración de conocimientos. El desarrollo de una perspectiva racional del mundo en que se vive. | Ejercicios en clase Participación Asistencia | Tareas Examen |

| | | | | | |
|--|------------------------------------|--|---|--------------------------------|---------------------|
| NOMBRE DE LA UNIDAD TEMÁTICA/BLOQUE TEMÁTICO: | Algunos trucos | | TIEMPO ESTIMADO PARA DESARROLLAR LA UNIDAD TEMÁTICA: | 6 horas (teoría y práctica) | |
| COMPETENCIAS A DESARROLLAR | SABERES | | | EVIDENCIAS DE DESEMPEÑO | |
| | CONOCIMIENTOS | HABILIDADES | ACTITUDES | DIRECTA | POR PRODUCTO |
| Conocer y comprender algunos trucos para el | Cálculo eficiente de energías y de | Manejar los conceptos particulares y algunos | El fortalecimiento de correctos hábitos de | Ejercicios en clase | Tareas |

| | | | | | |
|---|---|------------------------------------|---|---------------------------------|--------|
| manejo optimo de ambas técnicas de simulación molecular | fuerzas Lista de vecinos Correcciones de largo alcance Organización de un código Manejo de ficheros (inputs y outputs) del programa principal | trucos de la simulación molecular. | estudio y de análisis. La adquisición e integración de conocimientos. El desarrollo de una perspectiva racional del mundo en que se vive. | Participación Asistencia | Examen |
|---|---|------------------------------------|---|---------------------------------|--------|

| NOMBRE DE LA UNIDAD TEMÁTICA/BLOQUE TEMÁTICO: | Métodos semi-empíricos | | | TIEMPO ESTIMADO PARA DESARROLLAR LA UNIDAD TEMÁTICA: | 8 horas (teoría y práctica) |
|--|------------------------|--|--|--|-----------------------------|
| COMPETENCIAS A DESARROLLAR | SABERES | | | EVIDENCIAS DE DESEMPEÑO | |
| | CONOCIMIENTOS | HABILIDADES | ACTITUDES | DIRECTA | POR PRODUCTO |
| Conocer y comprender la manera de calcular la estructura electrónica mediante los métodos semi-empíricos para encontrar la estructura atómica de una molécula mediante el cálculo del mínimo de energía. | Métodos semi-empíricos | Manejar los conceptos básicos de los métodos semi-empíricos. | El fortalecimiento de correctos hábitos de estudio y de análisis. La adquisición e integración de conocimientos. El desarrollo de una perspectiva racional del mundo en que se vive. | Ejercicios en clase Participación Asistencia | Tareas Examen |

| NOMBRE DE LA UNIDAD TEMÁTICA/BLOQUE TEMÁTICO: | Métodos <i>ab-initio</i> | | | TIEMPO ESTIMADO PARA DESARROLLAR LA UNIDAD TEMÁTICA: | 8 horas (teoría y práctica) |
|---|--------------------------|-------------|-----------|--|-----------------------------|
| COMPETENCIAS A DESARROLLAR | SABERES | | | EVIDENCIAS DE DESEMPEÑO | |
| | CONOCIMIENTOS | HABILIDADES | ACTITUDES | DIRECTA | POR |

| | | | | | PRODUCTO |
|--|---|---|--|--|----------------------|
| Conocer y comprender la manera de calcular la estructura electrónica mediante los métodos <i>ab-initio</i> para encontrar la estructura atómica de una molécula mediante el cálculo del mínimo de energía. | Métodos <i>ab-initio</i> : Hartree-Fock DFT | Manejar los conceptos básicos de los métodos <i>ab initio</i> . | El fortalecimiento de correctos hábitos de estudio y de análisis. La adquisición e integración de conocimientos. El desarrollo de una perspectiva racional del mundo en que se vive. | Ejercicios en clase Participación Asistencia | Tareas Examen |

| NOMBRE DE LA UNIDAD TEMÁTICA/BLOQUE TEMÁTICO: | Métodos en sólidos periódicos | | TIEMPO ESTIMADO PARA DESARROLLAR LA UNIDAD TEMÁTICA: | 8 horas (teoría y práctica) | |
|---|-------------------------------|---|--|--|----------------------|
| COMPETENCIAS A DESARROLLAR | SABERES | | | EVIDENCIAS DE DESEMPEÑO | |
| | CONOCIMIENTOS | HABILIDADES | ACTITUDES | DIRECTA | POR PRODUCTO |
| Conocer y comprender la manera de calcular la estructura electrónica mediante los métodos en sólidos periódicos para encontrar la estructura atómica de una molécula mediante el cálculo del mínimo de energía. | Métodos en sólidos periódicos | Manejar los conceptos básicos de los métodos en sólidos periódicos. | El fortalecimiento de correctos hábitos de estudio y de análisis. La adquisición e integración de conocimientos. El desarrollo de una perspectiva racional del mundo en que se vive. | Ejercicios en clase Participación Asistencia | Tareas Examen |

| NOMBRE DE LA UNIDAD TEMÁTICA/BLOQUE TEMÁTICO: | Calculo de propiedades dentro de las aproximaciones de la Química Cuántica | TIEMPO ESTIMADO PARA DESARROLLAR LA UNIDAD TEMÁTICA: | 10 horas (teoría y práctica) |
|---|--|--|------------------------------|
|---|--|--|------------------------------|

| COMPETENCIAS A DESARROLLAR | SABERES | | | EVIDENCIAS DE DESEMPEÑO | |
|---|--|--|--|--|----------------------|
| | CONOCIMIENTOS | HABILIDADES | ACTITUDES | DIRECTA | POR PRODUCTO |
| Conocer y aprender a usar un software para hacer cálculos de potenciales cuánticos. | Introducción al software (Gaussian o similar) Uso del Software (Gaussian o similar) | Manejar un software para cálculos cuánticos. | El fortalecimiento de correctos hábitos de estudio y de análisis. La adquisición e integración de conocimientos. El desarrollo de una perspectiva racional del mundo en que se vive. | Ejercicios en clase Participación Asistencia | Tareas Examen |

ACTIVIDADES DE APRENDIZAJE (Sugeridas)

- Asistencia a seminarios de la División de Ciencias e Ingenierías, en particular aquellos de Termodinámica Estadística y de Simulación Molecular.

RECURSOS Y MATERIALES DIDÁCTICOS (Sugeridos)

- Recursos didácticos: Pizarrón, proyector de acetatos, computadora, cañón, bibliografía, aula de cómputo, red.
- Materiales didácticos: Acetatos, plumones para acetatos.

SISTEMA DE EVALUACIÓN

EVALUACIÓN: Será continua y permanente y se llevará a cabo en 3 momentos:

Diagnóstica: Por medio de un examen escrito muy breve o por preguntas generales en clase, el profesor puede estimar el conocimiento matemático, termodinámico y computacional con que cuentan los alumnos.

Formativa: Participación en clase y tareas.

Sumaria: Examen final escrito de conocimientos y un código de simulación funcionando y calculando correctamente en formato electrónico.

PONDERACIÓN (SUGERIDA):

- Examen: 50%
- Participación individual: 10%
- Proyecto desarrollado (código) 40%

FUENTES DE INFORMACIÓN

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA:

Para la parte de Simulación Molecular

1. Allen, M. P.; Tildesley, D. J. Computer Simulation of Liquids; Clarendon Press: Oxford, 1987.
2. Frenkel, D.; Smit, B. Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications, 2nd ed.; Academic Press: U. S. A., 2002.
3. McQuarrie, D. A. Statistical Mechanics, University Science Books: USA, 2000.

Para la parte de Química Computacional

4. Andrew R. Leach, Molecular Modelling (Principles and Applications), Edinburgh, Longmann, 1996.
2. Levine, Ira N., Quantum Chemistry, 5th ed, Prentice Hall, 1999.
3. McQuarrie, Donald A. y Simon, John D., Physical Chemistry: A Molecular Approach, University Science Books, 1997.
4. Lowe, John P., Quantum Chemistry, 2nd ed, Academic Press, 1997.

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA:

OTRAS FUENTES DE INFORMACIÓN:

- Para Simulación Molecular
- <http://www.ccp5.ac.uk/>
 - <http://www.gromacs.org/>
 - <http://www.princeton.edu/che/people/faculty/panagiotopoulos/group/>
 - <http://www.theo.chemie.tu-darmstadt.de/group/services/yasdoc/yasdoc.html>
- Para Química Computacional
- <http://www.gaussian.com/>