

Aplicaciones de la Química Teórica/ Química 2004

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES CUAUTITLAN

LICENCIATURA EN: QUÍMICA.

NOMBRE DE LA ASIGNATURA: APLICACIONES DE LA QUÍMICA TEÓRICA.

ÓRGANO INTERNO QUE COORDINA EL PROGRAMA DE LA ASIGNATURA:

DEPARTAMENTO DE: CIENCIAS QUÍMICAS.
SECCIÓN DE: FISICOQUÍMICA.

CICLO AL QUE PERTENECE: TERMINAL.

REQUISITO DE SERIACIÓN: NINGUNO.

CARÁCTER DE LA ASIGNATURA: OPTATIVA.

TIPO DE ASIGNATURA: TEÓRICO.

MODALIDAD: CURSO.

SEMESTRE: 8°.

NÚMERO DE HORAS /SEMANA/ SEMESTRE:

TEORÍA:

3

PRÁCTICA:

N° DE CRÉDITOS:

6

CLAVE

0803

Aplicaciones de la Química Teórica/ Química 2004

OBJETIVOS GENERALES DE LA ASIGNATURA.

Comprender la filosofía de los paquetes computacionales para cálculos en Química Teórica.

Resolver problemas sencillos utilizando los paquetes computacionales para cálculos en Química Teórica.

UNIDAD 1: EL USO DE PAQUETES COMPUTACIONALES PARA CÁLCULOS EN QUÍMICA TEÓRICA.

Número de horas de teoría:12.

OBJETIVO DE LA UNIDAD.

Ejecutar cálculos sencillos de SP, optimización de geometrías y localización de ET y analizar los resultados, desde el punto de vista conceptual y computacional.

1.1 El archivo de entrada para un cálculo en química teórica.

1.2 Cálculos de un single point.

1.3 Optimización de geometrías.

1.4 Localización de Estados de Transición.

1.5 Aplicaciones y Resolución de problemas.

UNIDAD 2: CALCULOS DE PROPIEDADES POR DIVERSOS MÉTODOS.

Número de horas de teoría:36.

OBJETIVO DE LA UNIDAD.

Ejecutar cálculos sencillos a diferentes niveles de la teoría, de índices energéticos y electrónicos y analizar los resultados obtenidos desde el punto de vista conceptual y computacional.

2.1 Mecánica y Dinámica Molecular.

2.1.1 Aplicaciones y Resolución de problemas.

2.2 Métodos semiempíricos para cúmulos y moléculas.

2.2.1 Aplicaciones y Resolución de problemas.

2.3 Métodos *ab initio* para cúmulos y moléculas.

2.3.1 Aplicaciones y Resolución de problemas.

2.4 Teoría de funcionales de la densidad para cúmulos y moléculas.

2.4.1 Aplicaciones y Resolución de problemas.

2.5 Teoría de funcionales de la densidad para sólidos.

2.5.1 Aplicaciones y Resolución de problemas.

METODOLOGÍA DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE.

Mínima exposición del profesor, la cual debe ser de una o dos clases por tema y debatir el contenido a través de seminarios en donde se discutan artículos de revistas y *actividades prácticas donde se desarrollen ejercicios y problemas* (ó se analicen ejemplos de los libros). Se recomienda el uso de acetatos, diapositivas, u otros medios audiovisuales en los que los mismos estudiantes puedan apoyarse para su exposición.

Esta técnica de enseñanza, requieren de la participación activa del estudiante y de sesiones de asesorías por parte del profesor, y tienen la ventaja de desarrollar en el estudiante habilidades importantes para su futura acción profesional como son la exposición oral, y la capacidad de sintetizar, analizar y generalizar, entre otras.

Aplicaciones de la Química Teórica/ Química 2004

Tanto en los seminarios como en las actividades prácticas será obligado el uso de paquetes computacionales.

PROPUESTA DE EVALUACIÓN.

Una evaluación escrita de conceptos generales, *además de* la participación en los Seminarios y *actividades prácticas* (entrega de trabajos escritos).

PERFIL PROFESIOGRÁFICO DEL DOCENTE.

Maestría en Físicoquímica ó Doctorado en Ciencias Químicas ambos con orientación hacia la Química Teórica.

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA.

1. Goodman, J.M. *Chemical applications of molecular modeling*, Springer-Verlag, New York, 1998.
2. Cramer, Ch. J. *Essentials of computational chemistry: Theory and models*, John Wiley and Sons, England, 2002.
3. Hinchliffer, A. *Molecular modeling for beginners*, Halsted Press, USA, 2003.
4. Leach, A.R. *Molecular modeling: principles and applications*, Royal Society of Chemistry, London, 2002.
5. Moore, E. *Molecular modeling and bonding*, Royal Society of Chemistry, London, 2002.

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

1. Hinchliffer, A. *Modeling molecular structures*, 2a., John Wiley and Sons, New York, 1996.
2. Sabin J.R. (editor), E. Brandas (editor). *Advances in quantum chemistry*, Academic Press, USA, 2003.
3. Zheng Hui Zhang, J. y J. Zh Zhang. *Theory and applications of quantum molecular dynamics*, World Scientific Publishers, New York, 1999.
4. Smith, W.B. *Introduction to Theoretical organic chemistry and molecular modeling*, John Wiley and Sons, New York, 1996.