

Laboratorio de Paquete Terminal en Química Teórica/ Química 2004

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES CUAUTITLAN

LICENCIATURA EN: QUÍMICA.

NOMBRE DE LA ASIGNATURA: LABORATORIO DE PAQUETE TERMINAL EN
QUÍMICA TEÓRICA.

ÓRGANO INTERNO QUE COORDINA EL PROGRAMA DE LA ASIGNATURA:

DEPARTAMENTO DE: CIENCIAS QUÍMICAS.
SECCIÓN DE: FISICOQUÍMICA.

CICLO AL QUE PERTENECE: CICLO TERMINAL.

REQUISITO DE SERIACIÓN: NINGUNO.

CARÁCTER DE LA ASIGNATURA: OPTATIVA.

TIPO DE ASIGNATURA: PRÁCTICO.

MODALIDAD: LABORATORIO.

SEMESTRE: 9°.

NÚMERO DE HORAS /SEMANA/ SEMESTRE:

TEORÍA:

PRÁCTICA:

N° DE CRÉDITOS:

CLAVE

Laboratorio de Paquete Terminal en Química Teórica/ Química 2004

OBJETIVO GENERAL DE LA ASIGNATURA.

Desarrollar y defender un proyecto de investigación, en temáticas relacionadas con las áreas de Química Teórica y Simulación computacional de estructuras moleculares, sólidos y superficies.

METODOLOGÍA DE TRABAJO.

1.- Las temáticas de los proyectos responderán a las líneas de investigación de los profesores que trabajen en el área de Físicoquímica Teórica de la Sección de Físicoquímica, distribuidos en las siguientes sub-áreas:

2.- Las estudiantes trabajarán en proyectos de investigación relacionados con las siguientes líneas generales de investigación:

- Catálisis Heterogénea.
- Farmacología cuántica.
- Química Atmosférica.
- Determinación de propiedades Termodinámicas por simulación computacional.

3.- Las etapas del proyecto serán:

- Selección del problema de investigación.
- Revisión Bibliográfica.
- Elaboración y defensa de un pre-proyecto de trabajo.
- Trabajo Experimental.
- Elaboración del informe final.
- Defensa del informe final.

El proyecto de investigación, preferentemente deberá culminar con su tesis de Licenciatura, o ser parte de ella.

PERFIL DE LOS ASESORES.

Egresados de una licenciatura en el área de Ciencias Químicas, con estudios de maestría o doctorado en el área de la Química Teórica, subáreas de Química Cuántica y simulación con métodos numéricos o de Dinámica Molecular.

ASESORES:

- Dra. Esther Agacino Valdés.
- Dr. Rodolfo Gómez Balderas.
- Dr. Manuel Martínez Magadán.
- M en C Ana Ma. Velázquez Sánchez.
- Dr. Ricardo Baltazar Ayala.
- Dra. Gloria Cruz León.
- M en C Guillermo Rodríguez Romero
- Dra. Suemi Rodríguez Romo.

Laboratorio de Paquete Terminal en Química Teórica/ Química 2004

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN.

Cátedra de investigación: "*Modelación Molecular con Métodos de la Química Teórica y Computacional*".

INFRAESTRUCTURA.

- 2 PC Pentium III de 20GB 866MHz y 1GHz, 128MB en RAM, Disco Duro 20GB.
- 1 Estación de trabajo INDY.
- Acceso a supercomputadora ORIGIN2000-UNAM.

BIBLIOGRAFÍA

La bibliografía estará de acuerdo y en apoyo a los proyectos realizados.