

1.- DATOS DE LA ASIGNATURA

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

2.- PRESENTACIÓN

Características 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 adecuado programa, 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.²

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

¹ Sistema de asignación y transferencia de créditos académicos

² Libro de divulgación “Nanociencia y Nanotecnología. Entre la ficción del presente y la tecnología del futuro”. Fundación Española para la Ciencia y Tecnología.

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 unidades. En la primera unidad 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 la segunda unidad, 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 la tercera unidad, 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 la cuarta unidad 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 la última unidad 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, sabemos que no es fácil, pero es nuestra tarea.

3.- COMPETENCIAS A DESARROLLAR

Competencias específicas:	Competencias genéricas
<p>Predecir las propiedades geométricas y electrónicas de materiales específicos, tales como, la geometría molecular, distancia de enlace, ángulos de enlace de las moléculas, los ángulos de torsión, los ángulos diedros, las trayectorias de reacción e índices de reactividad química a través del modelado computacional.</p>	<p>Competencias instrumentales</p> <ul style="list-style-type: none">• Habilidad de comunicación oral y escrita.• Habilidad para el análisis, la síntesis, la elaboración de informes y su presentación.• Habilidad y destreza en los aspectos prácticos relacionados con el trabajo en un laboratorio de computación.• Habilidad relacionada con las herramientas informáticas y con las tecnologías de información.• Habilidad para la solución de problemas cualitativos y cuantitativos.• Conocimiento de una segunda lengua. <p>Competencias interpersonales</p> <ul style="list-style-type: none">• Capacidad crítica y autocrítica.• Trabajo en equipo.• Habilidades interpersonales. <p>Competencias sistémicas</p> <ul style="list-style-type: none">• Habilidad para el estudio y el aprendizaje de forma autónoma, necesarios para la formación continua y el desarrollo profesional.• Habilidad en la aplicación del razonamiento deductivo y en el aprovechamiento de la capacidad creativa, mediante la introducción en la investigación.

4.- HISTORIA DEL PROGRAMA

Lugar y fecha de elaboración o revisión	Participantes	Observaciones (cambios y justificación)
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.	Primera Reunión Nacional de diseño e innovación curricular para el desarrollo de competencias profesionales de las carreras de Ingeniería en Nanotecnología e Ingeniería 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	Segunda 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.

5.- OBJETIVO(S) GENERAL(ES) DEL CURSO (competencias específicas a desarrollar en el curso)

Predecir las propiedades geométricas y electrónicas de materiales específicos, tales como, la geometría molecular, distancia de enlace, ángulos de enlace de las moléculas, los ángulos de torsión, los ángulos diedros, las trayectorias de reacción e índices de reactividad química a través del modelado computacional.

6.- COMPETENCIAS PREVIAS

Conocimientos básicos de enlace químico, estructura de la materia, mecánica cuántica y programación.

7.- TEMARIO

Unidad	Temas	Subtemas
1	Introducción	1.1 Química Cuántica, Química Teórica y Computacional (QTC). 1.2 Origen de la mecánica cuántica. 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 Mecánica molecular. 2.2 Mecánica clásica <i>versus</i> Mecánica cuántica. 2.3 Bases de la Mecánica clásica. 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 Obtención de resultados con significado químico. 4.3 Índices de reactividad química.
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.
--	--	--------------------------------------------------------------

8.- SUGERENCIAS DIDÁCTICAS (desarrollo de competencias genéricas)

- Enfatizar los conceptos claves, los principios o argumentos centrales del tema.
- Realizar síntesis y abstracción de la información relevante en forma oral o escrita.
- Generar técnicas de aprendizaje por medio de dinámicas grupales e individuales.
- Propiciar que el estudiante imagine nuevas formas de aplicar los conocimientos.
- Incrementar la realización de actividades o tareas que den cuenta por medio de evidencias, de que la competencia se ha desarrollado.
- Propiciar el planteamiento de preguntas y la solución de problemas, así como el aprendizaje a partir del error.
- Estimular la búsqueda amplia, profunda y fundamentada de información.
- Uso de nomenclatura y terminología científica, tecnológica y humanística con precisión.
- Retroalimentar de manera permanente el trabajo de los estudiantes.
- Proponer ejemplos guía.
- Organizar tutorías personalizadas para orientar y resolver dudas.
- Realizar sesiones prácticas con computadora en donde se planteen una serie de cuestiones de modelado para que el estudiante consolide su habilidad de manejar los conceptos aprendidos de forma integrada.

9.- SUGERENCIAS DE EVALUACIÓN

La evaluación continua formativa y de aprendizaje valorando los progresos del alumno a partir de:

- Resolución de ejercicios y casos prácticos.
- Participación en tutorías y talleres grupales.
- Realización de trabajo computacional.
- Elaboración y presentación de informes.
- Elaboración de un trabajo final individual

Evidencia de comportamiento

- Observación: Participación activa en clase.
- Dinámica de grupos: Mesa redonda, debates y exposiciones.

Evidencia de desempeño

- Investigación: En forma individual o grupal sobre los temas a desarrollar.
- Problemas: Trabajo en forma independiente en problemas teóricos-prácticos propuestos.

- Reportes: Desarrollo de trabajo computacional.

Evidencia de producto

- Aprendizaje orientado a proyectos: Elaboración de un trabajo escrito sobre la resolución mediante la simulación computacional de un problema concreto sencillo aplicado a un problema específico de interés industrial o de química fina a escala laboratorio, propuesto por el profesor y la exposición de éste en un taller grupal.

Evidencia de conocimiento

- Pruebas objetivas de los temas vistos en clase: Examen teórico.

10.- UNIDADES DE APRENDIZAJE

Unidad 1: Introducción

Competencia específica a desarrollar	Actividades de Aprendizaje
Discutir 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.	<ul style="list-style-type: none"> • Reconocer que la Química cuántica, Química teórica y Química computacional es la misma. • Investigar el desarrollo histórico de la Mecánica cuántica. • Discutir el significado e importancia de la constante de Planck. • Analizar el comportamiento de los microsistemas. • Interpretar el principio de incertidumbre de Heisenberg. • Discutir qué predicciones se pueden realizar mediante la Química computacional. • Debatir el impacto de la Química cuántica computacional en la sociedad moderna.

Unidad 2: Métodos no-cuánticos incluidos en la Química Teórica y Computacional

Competencia específica a desarrollar	Actividades de Aprendizaje
Aplicar los métodos de simulación de mecánica molecular para obtener energías asociadas a las posibles conformaciones estructurales.	<ul style="list-style-type: none"> • Revisar las bases de la mecánica clásica. • Realizar un cuadro comparativo de la mecánica clásica y mecánica cuántica. • Investigar el modelo de Lennard-Jones

	<p>y el teorema de Buckingham.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Investigar el concepto de campos de fuerza y tipos de campo de fuerza. • Discutir las distintas filosofías de parametrización para la generación de campos de fuerza. • Aplicar la metodología de campos de fuerza en la búsqueda de conformeros.
--	------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

Unidad 3: Métodos de Química Cuántica

Competencia específica a desarrollar	Actividades de Aprendizaje
<p>Conocer los principales métodos de química cuántica basados en la resolución aproximada de la ecuación de Schrödinger.</p> <p>Aplicar la mecánica cuántica en la obtención de sus propiedades enfocadas a la distribución electrónica.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Investigar los postulados de la mecánica cuántica. • Revisar la ecuación de Schrödinger. • Definir el concepto base y funciones base que existen. • Redactar las ventajas y limitaciones de los principales métodos semiempíricos. • Analizar los fundamentos de la teoría del funcional de la densidad. • Identificar los principales métodos que incorporan la correlación electrónica en el cálculo. • Interpretar el concepto de superficie de energía potencial. • Relacionar el tamaño de un sistema con el costo computacional.

Unidad 4: Modelación

Competencia específica a desarrollar	Actividades de Aprendizaje
<p>Utilizar los métodos computacionales para la representación de la estructura y reactividad de las moléculas.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • De acuerdo a los programas disponibles, iniciar con el modelado molecular y aprender el uso de las herramientas de trabajo. • Representar gráficamente la estructura geométrica de las moléculas. • Predecir la estructura y estabilidad de los sistemas químicos. • Estudiar la dependencia de la energía

	<p>con los ángulos de torsión.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Relacionar la energía de una molécula con su estructura. • Determinar los átomos más reactivos en una molécula mediante un análisis de distribución de cargas. • Calcular los índices de reactividad química global y local de un sistema sencillo (dureza, blandura, potencial químico, electrofilicidad, función de Fukui).
--	----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

Unidad 5: Programas computacionales

Competencia específica a desarrollar	Actividades de Aprendizaje
Utilizar programas computacionales para predecir las propiedades de sistemas moleculares bajo una variedad de condiciones.	<ul style="list-style-type: none"> • Utilizar los diferentes programas de química computacional para modelado molecular, optimización de geometrías y cálculos de descriptores químicos de ambiente amigable bajo plataforma Windows. • Calcular magnitudes moleculares y de agrupaciones macroscópicas de estas mediante espectroscopia IR, UV y NMR. • Distinguir los comandos básicos del sistema operativo UNIX utilizados en paquetes computacionales.

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.

12.- PRÁCTICAS PROPUESTAS

1. Descripción de programas computacionales y ejemplos sencillos de aplicación.
2. Estabilidad relativa de dos confórmeros.
3. Cálculo de propiedades moleculares para una molécula sencilla.
4. Análisis conformacional.
5. Espectroscopía UV. Estudio de las transiciones electrónicas.
6. Espectroscopía IR y RMN.