

UNIDAD: IZTAPALAPA		DIVISIÓN CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERÍA	
NIVEL: LICENCIATURA		EN QUÍMICA	
CLAVE: 2141086	UNIDAD DE ENSEÑANZA - APRENDIZAJE: LABORATORIO DE FISICOQUÍMICA COMPUTACIONAL		TRIM: VII-X
HORAS TEORÍA: 0	SERIACIÓN 2141084		CRÉDITOS: 5
HORAS PRÁCTICA: 5			OPT/OBL: OBL.

OBJETIVO(S):

GENERALES

Que al final del curso el alumno sea capaz de:

- Analizar sistemas de interés químico mediante el uso de programas computacionales de estructura electrónica, dinámica molecular o de Monte Carlo.
- Realizar experimentos computacionales para obtener propiedades relacionadas con la reactividad química de moléculas y con la fisicoquímica de fluidos.

ESPECÍFICOS

Que al final del curso el alumno sea capaz de:

- Relacionar los conceptos de la fisicoquímica, con la solución analítica y numérica presentada a través de programas computacionales.
- Describir la interacción entre moléculas grandes usando campos de fuerza.
- Describir la estructura electrónica de átomos y moléculas usando los métodos de la química cuántica.
- Analizar la evolución de las propiedades de especies químicas a lo largo de una trayectoria de reacción.
- Describir la reactividad química de una molécula a partir de su estructura electrónica.
- Determinar propiedades espectroscópicas de moléculas y fluidos.
- Realizar simulaciones de fluidos en condiciones similares a las experimentales.
- Analizar el efecto que las fuerzas intermoleculares tienen sobre las propiedades de la materia.
- Aplicar simulaciones numéricas para obtener información de fluidos en distintas fases.
- Analizar el efecto que tienen especies iónicas en las propiedades de soluciones acuosas.

NOMBRE DEL PLAN		LICENCIATURA EN QUÍMICA	2/3
CLAVE 2141086	UNIDAD DE DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE LABORATORIO DE FISICOQUÍMICA COMPUTACIONAL		

CONTENIDO SINTÉTICO:

1. Estructuras estables en mecánica molecular.
2. Parámetros de estructura molecular.
3. Superficie de energía potencial para una reacción.
4. Reactividad química.
5. Propiedades espectroscópicas: vibracional y electrónica.
6. Estimación de fuerzas moleculares (a partir de un calculo cuántico).
7. Algoritmos de simulación molecular, control de temperatura y presión.
8. Ordenamiento molecular en gases, líquidos y sólidos.
9. Separación de fases y condiciones de equilibrio.
10. Fluidos en interfases y tensión superficial.
11. Propiedades físicas de soluciones iónicas.

MODALIDADES DE CONDUCCIÓN DEL PROCESO DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE:

- Clase de presentación en forma de Conferencia magistral dirigida por el profesor.
- Clase de laboratorio en forma de taller en salas de cómputo donde los alumnos desarrollarán experimentos dirigidos por el profesor.
- Seminario impartido por los alumnos (individual o por equipo).

Se recomienda que las sesiones de taller sean organizadas con base en la resolución de problemas utilizando paquetes computacionales para el cálculo de estructura electrónica de átomos, moléculas y sólidos, dinámica molecular o de Monte Carlo. Se hará énfasis en las aplicaciones dedicando un tiempo inicial a la demostración del uso de los paquetes computacionales empleados.

En las sesiones de presentación se discute el alcance y limitación del programa computacional empleado, así como ejemplos demostrativos del mismo.

MODALIDADES DE EVALUACIÓN:

Evaluación Global:

- Pruebas abiertas parciales (al menos dos procurando que sean de carácter acumulativo o integrador)
- Reporte escrito y presentación oral (al menos uno de cada uno)
- Pruebas de ejecución. Experimentos computacionales (taller de cómputo)
- Tareas periódicas (al menos tres)
- La ponderación de todas estas evaluaciones quedará a juicio del profesor.

Evaluación de Recuperación:

- El curso no podrá acreditarse mediante una evaluación de recuperación.

NOMBRE DEL PLAN		LICENCIATURA EN QUÍMICA	3/3
CLAVE 2141086	UNIDAD DE DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE LABORATORIO DE FISICOQUÍMICA COMPUTACIONAL		

BIBLIOGRAFÍA NECESARIA O RECOMENDABLE:

1. Allen, M. P. y Tildesley, D. J. *Computer Simulations of Liquids*, Oxford University Press, 2002.
2. Cramer, C. J., *Essentials of Computational Chemistry*, 2ª Edición, Wiley, 2004.
3. Foresman, J. B. y Frisch, A. *Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods*, 2ª Edición, Gaussian 1998.
4. Leach, A. "Molecular Modelling: Principles and Applications" 2ª Edición, 2001.
5. Manual de experimentos computacionales. www.quimica.izt.uam.mx
6. Rogers, D., *Computational Chemistry Using the PC*. Wiley Interscience. 2003.
7. Smit, B. y Frenkel, D. *Understanding molecular simulations*, Academic Press, 2001.