



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA

PROGRAMA DE ESTUDIOS

UNIDAD	IZTAPALAPA	DIVISION	CIENCIAS BASICAS E INGENIERIA	1 / 3
NOMBRE DEL PLAN LICENCIATURA EN QUIMICA				
CLAVE	UNIDAD DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE		CRED.	5
2141086	LABORATORIO DE FISICOQUIMICA COMPUTACIONAL		TIPO	OBL.
H. TEOR. 0.0	SERIACION		TRIM.	VII-X
H. PRAC. 5.0	2141084 Y 2141089			

OBJETIVO(S) :

Objetivos Generales:

Que al final de la UEA 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.

Objetivos Específicos:

Que al final de la UEA 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.



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA

ADECUACION
PRESENTADA AL COLEGIO ACADEMICO
EN SU SESION N.º 420

EL SECRETARIO DEL COLEGIO

- Analizar el efecto que tienen especies iónicas en las propiedades de soluciones acuosas.

CONTENIDO SINTETICO:

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 CONDUCCION 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 EVALUACION:**Evaluación Global:**

- Pruebas abiertas parciales (al menos dos procurando que sean de carácter



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

ADEGUACION
PRESENTADA AL COLEGIO ACADÉMICO
EN SU SESION NUM. 3/20

EL SECRETARIO DEL COLEGIO

CLAVE 2141086

LABORATORIO DE FISICOQUIMICA COMPUTACIONAL

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.

BIBLIOGRAFIA 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.



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA

ADECUACION
PRESENTADA AL COLEGIO ACADÉMICO
EN SU SESION NUM. 420

EL SECRETARIO DEL COLEGIO