



DATOS GENERALES

Nombre del curso

MÉTODOS SELECTOS DE QUÍMICA COMPUTACIONAL

PRESENTACIÓN GENERAL

Justificación

Este programa se presenta como parte de los cursos opcionales del posgrado en Química Bioorgánica. La Química Computacional abarca una serie importante de herramientas, tales como dinámica y mecánica molecular, teoría de funcionales de la densidad y métodos de solvatación, entre otras. El conocimiento de tales herramientas es necesario para el análisis teórico de problemas de Química, además de ser parte complementaria del análisis experimental.

OBJETIVOS GENERALES DEL CURSO

El alumno aprenderá los métodos de Química Computacional necesarios para el análisis y estudio de los sistemas moleculares relacionados con su proyecto de tesis.

UNIDADES, OBJETIVOS PARTICULARES Y TEMAS

UNIDAD 1

Matemáticas para química cuántica

Objetivos particulares

El alumno aprenderá las herramientas matemáticas básicas para Química Cuántica con el objeto de poder comprender las descripciones matemáticas de los conceptos de Química Computacional

Temas

- 1.1 Espacios vectoriales y operadores lineales.
- 1.2 Notación de Dirac.

UNIDAD 2

Campos de fuerza

Objetivos particulares

El alumno revisará conceptos relacionados con métodos que requieren de campos de fuerza, así como los conceptos básicos y su utilidad

Temas

- 2.1 Energía.
- 2.2 Parametrización.
- 2.3 Mecánica molecular.
- 2.4 Dinámica molecular.

UNIDAD 3

Conjuntos de funciones de base

Objetivos particulares
El alumno aprenderá los conceptos básicos relacionados con los conjuntos de funciones de base, así como la clasificación y aplicación de las mismas.
Temas
3.1 Orbitales tipo Gaussian y tipo Slater. 3.2 Clasificación.

UNIDAD 4
Métodos de estructura electrónica
Objetivos particulares
El alumno aprenderá los métodos básicos de estructura electrónica empleados en Química Computacional, así como su utilidad.
Temas
4.1 Teoría del campo autoconsistente. 4.2 Método de Hartree-Fock. 4.3 Métodos semiempíricos.

UNIDAD 5
Métodos de correlación electrónica
Objetivos particulares
El alumno aprenderá las herramientas matemáticas básicas para Química Cuántica con el objeto de poder comprender las descripciones matemáticas de los conceptos de Química Computacional.
Temas
5.1 Interacción de configuración. 5.2 Teoría de perturbaciones de muchos cuerpos. 5.3 Cúmulos acoplados.

UNIDAD 6
Métodos de funcionales de la densidad
Objetivos particulares
El alumno aprenderá las herramientas matemáticas básicas para Química Cuántica con el objeto de poder comprender las descripciones matemáticas de los conceptos de Química Computacional
Temas
6.1 Postulados de Hohenberg-Kohn. 6.2 Teoría de Kohn-Sham. 6.3 Funcionales de intercambio y correlación.

UNIDAD 7
Otros temas selectos
Objetivos particulares
El alumno aprenderá las herramientas matemáticas básicas para Química Cuántica con el objeto de poder comprender las descripciones matemáticas de los conceptos de Química Computacional.
Temas
7.1 Modelos de solvatación. 7.2 Docking y QSAR.

7.3 Reactividad: funciones de Fukui, AIM, etc.

7.4 Estado sólido.

TÉCNICAS DIDÁCTICAS Y ASPECTOS METODOLÓGICOS

De enseñanza:

- Encuadre.
- Exposición con apoyo tecnológico variado.
- Argumentación.
- Moderación de debate.
- Monitoreo de ejercicios de transferencia del conocimiento con otras asignaturas.
- Lectura comentada.
- Asociación de ideas.
- Análisis y comparación.
- Estudio y discusión de problemas.
- Organización de trabajo individual o en equipo.
- Seguimiento de tareas.

De aprendizaje:

- Exposición de motivos y metas.
- Toma de notas.
- Debate sobre el conocimiento adquirido.
- Acceso, evaluación, recuperación y uso de información en fuentes diversas en inglés, principalmente, y en español.
- Lectura, síntesis e interpretación de información.
- Discusión de casos.
- Organización de información.
- Tareas para estudio independiente.

EQUIPO NECESARIO

- Equipo de cómputo.
- Video proyector.
- Recursos multimedia interactivos, e.g., Eminus.
- Pintarrón.
- Marcadores.
- Unidades de almacenamiento (mín. 8 GB).
- Calculadora científica.

BIBLIOGRAFÍA

Bibliografía básica:

- Jensen, F. *Introduction to Computational Chemistry*, 3a ed. John Wiley & Sons, Inc.: England, 2017.
- Lewars, E.G. *Computational Chemistry: Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics*, 3a ed. Springer: Switzerland, 2016.
- Cramer, C.J. *Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models*, 2a ed. John Wiley & Sons, Inc.: England, 2007.
- Ramachandra, K.I.; Deepa, G.; Namboori, K. *Computational Chemistry and Molecular Modeling: Principles and Applications*. Springer Verlag: Berlin, 2008.

- Heine, T.; Joswig, J.-O.; Gelessus, A. *Computational Chemistry Workbook: Learning Through Examples*. Wiley-VCH: Weinheim, 2009.

Bibliografía complementaria:

- Jensen, J.H. *Molecular Modeling Basics*. Taylor & Francis Group: Boca Raton, FL, 2010.
- Bachrach, S.M. *Computational Organic Chemistry*, 2a ed. John Wiley & Sons, Inc.: New Jersey, 2014.
- Hinchliffe, A. *Molecular Modelling for Beginners*, 2a ed. John Wiley & Sons: England, 2008.
- Leach, A. *Molecular Modelling: Principles and Applications*, 2a ed. Prentice Hall: New Jersey, 2001.
- Koch, W.; Holthausen, M. C. *A Chemist's Guide to Density Functional Theory*, 2a ed. Wiley-VCH: Germany, 2001.

REFERENCIAS ELECTRÓNICAS

- NIST Chemistry Webbook: <http://webbook.nist.gov/chemistry/> (diciembre 2018)
- EMSL Basis Set Exchange: <https://bse.pnl.gov/bse/portal> (diciembre 2018)

OTROS MATERIALES DE CONSULTA

- Artículos relacionados con la experiencia educativa, de preferencia, correspondientes a revistas especializadas indizadas de circulación internacional, e.g., *Journal of Computational Chemistry*, *Journal of Chemical Theory and Computation*, *Journal of Theoretical and Computational Chemistry*, etc.

EVALUACIÓN

Sumatoria		
Forma de Evaluación	Concepto	Porcentaje
	Participación en clase	20 %
	Tareas	20 %
	Examen final	60 %
	TOTAL	100 %