



**UAEM** | Universidad Autónoma  
del Estado de México

**SD**  
Secretaría de Docencia



Universidad Autónoma del Estado de México • Secretaría de Docencia • Dirección de Estudios Profesionales

# **Universidad Autónoma del Estado de México**

## **Licenciatura de Químico 2003**

**Programa de Estudios:**

**Aplicaciones del Modelado Molecular**



**I. Datos de identificación**

Licenciatura

Unidad de aprendizaje  Clave

Carga académica      
Horas teóricas Horas prácticas Total de horas Créditos

Período escolar en que se ubica

Seriación    
UA Antecedente UA Consecuente

**Tipo de Unidad de Aprendizaje**

Curso  Curso taller   
Seminario  Taller   
Laboratorio  Práctica profesional   
Otro tipo (especificar)

**Modalidad educativa**

Escolarizada. Sistema rígido  No escolarizada. Sistema virtual   
Escolarizada. Sistema flexible  No escolarizada. Sistema a distancia   
No escolarizada. Sistema abierto  Mixta (especificar)

**Formación común**

Ingeniería Química 2003  Químico Farmacéutico Biólogo 2006   
Química en Alimentos 2003

**Formación equivalente**

**Unidad de Aprendizaje**

Ingeniería Química 2003   
Químico Farmacéutico Biólogo 2006   
Química en Alimentos 2003



## II. Presentación

La Unidad de Aprendizaje (UA) de Aplicaciones del modelado molecular que aquí se presenta se ubica en el área de acentuación de Química Computacional y pretende aportar al alumno conocimientos de la química como una ciencia activa y en continuo crecimiento; su importancia es fundamental para el entendimiento de la química, pues permite que el alumno adquiera los conocimientos y habilidades para modelar moléculas y reacciones; y las aplicaciones prácticas que ellos presentan, completando la formación del egresado como un profesionista que aportará beneficios para el logro de mejores condiciones de vida en nuestro mundo tanto en el ámbito de la práctica profesional, como en los del conocimiento y preservación de la naturaleza, contribuyendo por lo tanto al mejoramiento del entorno social en el que se desarrolla.

Las competencias que la UA promueve en el estudiante tienen un carácter integral, el nivel cognoscitivo pretende alcanzar los niveles de comprensión de conceptos y su aplicación en la solución de problemas relacionados con la química cuántica como un área de gran desarrollo y creciente interés, promueve la comunicación efectiva al participar en trabajos en equipo, comprometiéndose en un desempeño de calidad en el trabajo, que le permitan de manera eficaz iniciar los estudios de su profesión ante los retos actuales y futuros del entorno.

La UA consta de nueve unidades de competencia: Métodos Hartree-Fock y Post-Hartree-Fock, Métodos basados en la teoría de funcionales de la densidad, Estados de transición y superficie de energía potencial, Simulación de espectros, Análisis de población. Por lo que estrategias como la investigación documental, la discusión de temas, exposiciones del profesor y de los estudiantes conformaran las actividades centrales durante esta UA.

Los criterios de evaluación tienen un carácter de proceso continuo en el cual la realimentación oportuna a los estudiantes acerca de su desempeño será factor clave en el aprendizaje, de manera que el estudiante realizará trabajos previos y posteriores a las sesiones de clase como: investigación documental de temas y resolución de problemas; trabajo activo en clase (discusión de temas, resolución de problemas tipo y exposiciones ante el grupo); y presentación de las evaluaciones tanto las que señale el calendario oficial respectivo, como la de diagnóstico y algunas de carácter formativo.



### III. Ubicación de la unidad de aprendizaje en el mapa curricular

<b>Núcleo de formación:</b>	<b>Integral</b>
<b>Área Curricular:</b>	<b>Ciencias del Perfil Profesional</b>
<b>Carácter de la UA:</b>	<b>Optativa</b>

### IV. Objetivos de la formación profesional.

#### Objetivos del programa educativo:

Formar y capacitar a los estudiantes con bases humanísticas, científicas y tecnológicas mediante el conocimiento de los principios y fundamentos de las Matemáticas y Ciencias Naturales para lograr competencias sustantivas propias de las Ciencias de la Disciplina, y de la Química aplicada en tres posibles orientaciones, así como desarrollar habilidades superiores del pensamiento reforzando actitudes y valores para que aplicando las metodologías apropiadas sean capaces de resolver problemas inherentes a su profesión, con ética y excelencia, promoviendo su superación y la mejora de su entorno, y como consecuencia incrementar la calidad de vida del país.

#### Objetivos del núcleo de formación:

Proporciona una visión integradora-aplicativa de carácter interdisciplinario y transdisciplinario, que complementa y orienta la formación al permitir opciones para su ejercicio profesional.

#### Objetivos del área curricular o disciplinaria:

### V. Objetivos de la unidad de aprendizaje.

Proporcionar a los estudiantes conocimientos y habilidades para modelar sistemas moleculares y mecanismos de reacción, así como fortalecer y desarrollar habilidades, actitudes y valores que les permitan trabajar de manera individual o en equipo para la resolución de problemas relacionados a la UA. Con una visión de respeto orientada a la calidad en el trabajo, la perseverancia y tolerancia, así como la disposición a aprender a aprender.



## VI. Contenidos de la unidad de aprendizaje y su organización

### Unidad 1. Métodos Hartree-Fock y Post-Hartree-Fock

**Objetivo:** Conocer los métodos Hartree-Fock y Post-Hartree-Fock, para que el alumno pueda modelar sistemas moleculares que requieran las contribuciones del intercambio y la correlación. Mostrando calidad en el trabajo tanto individual como en equipo. Con una visión de respeto, perseverancia y tolerancia, así como la disposición de aprender a aprender.

- 1.1 Repaso de las ecuaciones Hartree-Fock
- 1.2 Funciones de Bases: Base mínima, valencia dividida
- 1.3 Correlación electrónica
- 1.4 Métodos Perturbativos
- 1.5 Interacción de configuraciones
- 1.6 Cumulos acoplados

### Unidad 2. Métodos basados en DFT

**Objetivo:** Conocer los métodos basados en la teoría de funcionales de la densidad (DFT) para que el alumno pueda modelar sistemas moleculares que requieran las contribuciones del intercambio y la correlación a partir de las propiedades de la densidad electrónica. Mostrando calidad en el trabajo tanto individual como en equipo. Con una visión de respeto, perseverancia y tolerancia, así como la disposición de aprender a aprender.

- 2.1 Teoremas de Hohenberg y Kohn
- 2.2 Metodo de Kohn-sham
- 2.3 Funcionales de intercambio y correlación
- 2.4 Desarrollo de funcionales

### Unidad 3. Estados de transición y SEP

**Objetivo:** Aprender a localizar Estados de transición y determinar superficies de energía potencial (SEP), para que el alumno sea capaz de modelar reacciones químicas y proponer mecanismos de reacción. Mostrando calidad en el trabajo tanto individual como en equipo. Con una visión de respeto, perseverancia y tolerancia, así como la disposición de aprender a aprender.

- 3.1 Métodos de optimización de geometría molecular



3.2 Métodos de búsqueda de estados de transición

3.3 Cálculo de frecuencias

3.4 Cálculo de coordenada intrínseca de reacción

3.5 Cálculo de propiedades termoquímicas

#### Unidad 4. Simulación de espectros

**Objetivo:** Aprender a Simular espectros moleculares, para que el alumno sea capaz modelar las propiedades espectroscópicas de moléculas para poder identificar la estructura de compuestos. Mostrando calidad en el trabajo tanto individual como en equipo. Con una visión de respeto, perseverancia y tolerancia, así como la disposición de aprender a aprender.

4.1 Cálculo de espectros de infrarrojo y raman

4.2 Cálculo de espectros UV-vis a partir de estados excitados

4.3 Cálculo de espectros de resonancia magnética nuclear

#### Unidad 5. Análisis de población

**Objetivo:** Conocer los diferentes esquemas de análisis de población, para que el alumno sea capaz de explicar y predecir la reactividad de sistemas moleculares. Mostrando calidad en el trabajo tanto individual como en equipo. Con una visión de respeto, perseverancia y tolerancia, así como la disposición de aprender a aprender.

5.1 Partición de Mülliken

5.2 Partición Natural

5.3 Partición de la densidad electrónica y el potencial electrostático

5.4 Índices de reactividad DFT

### VII. Sistema de Evaluación

- ✓ En el desarrollo de la UA se evaluará la identificación y la aplicación de los conocimientos, las habilidades adquiridas, las actitudes y valores desarrollados, mediante:
  - Actividades individuales como: Elaboración de mapas conceptuales o gráficos de recuperación y resolución de series de problemas (exámenes previos y departamentales)



- Actividades en equipo como: Elaboración de mapas conceptuales o gráficos de recuperación, investigación documental escrita y exposición de investigación documental escrita.
- ✓ La UA se acreditará a través de dos evaluaciones parciales y una final sumaria (equivalente al examen ordinario), con un promedio mínimo de calificación de 6.0 puntos en una escala de 10.0 para ser promovido. No hay pase automático, es obligatoria la presentación del examen departamental final.
- ✓ Los porcentajes de las calificaciones e integración de cada evaluación son los siguientes:
  - Primera evaluación 30%
  - Segunda evaluación 30%
  - Evaluación final 40%
- ✓ Las evaluaciones primera, segunda y final se conformaran por las siguientes actividades:
  - Actividades en o fuera del aula 30%
    - Individuales 40%
      - Elaboración individual de mapa conceptual o gráfico de recuperación 30%
      - Examen previo 70%
    - En equipo 60%
      - Elaboración individual de mapa conceptual o gráfico de recuperación 30%
      - Investigación documental escrita 40%
      - Exposición de investigación documental escrita 40%
- Examen departamental 70%

### VIII. Acervo bibliográfico

Cramer, C. J. "Essentials of computational chemistry: theories and models", John Wiley and Sons, 2004

Levine, Ira N. "Química Cuántica", Pearson Prentice Hall, 2001.

Cuevas, G; Cortés, F. "Química Computacional", Fondo de Cultura Económica, 2001

Young, D. C. "Computational Chemistry" John Wiley and Sons, 2001