



UNIVERSIDAD DE GUADALAJARA

Centro Universitario de los Lagos

División de Estudios de la Biodiversidad e Innovación Tecnológica

Departamento de Ciencias de la Tierra y de la Vida

1. IDENTIFICACIÓN DEL CURSO

Nombre de la materia

Química Computacional

Clave de la materia:	Horas de teoría:	Horas de práctica:	Total de Horas:	Valor en créditos:
	40	20	60	6

Tipo de curso: (Marque con una X)					
C= Curso	P= Práctica	CT = Curso-Taller	X M=Módulo	C= Clínica	S= Seminario

Nivel en que ubica: (Marque con una X)	
L=Licenciatura	X P=Posgrado

Prerrequisitos formales (Materias previas establecidas en el Plan de Estudios)	Prerrequisitos recomendados (Materias sugeridas en la ruta académica aprobada)
	Ecuaciones Diferenciales, Tecnologías de la Información y Comunicación.

Departamento:	Ciencias de la Tierra y de la Vida	
Carrera:	Ingeniería Bioquímica	
Área de formación:	Optativa	
Historial de revisiones:	Fecha:	Responsable:
Elaboración		Dr. David Alejandro Hernández Velázquez Dr. Francisco José Tenorio Rangel

Academia:	Química
Aval de la Academia:	

2. OBJETIVO GENERAL

Que el alumno sea capaz de determinar y analizar las geometrías moleculares, reactividades y propiedades de sistemas de interés empleando métodos derivados de mecánica molecular, ab initio, semiempíricos y de Teoría de Funcionales de la densidad.

3. CONTENIDO

Temas y Subtemas

1. Sistema operativo Linux.
2. Superficie de energía potencial.
3. Mecánica Molecular.
4. Mecánica cuántica en Química Computacional. Métodos ab initio.
5. Métodos Semiempíricos.
6. Teoría de Funcionales de la Densidad.

4. BIBLIOGRAFÍA BÁSICA (Preferentemente ediciones recientes, 5 años)

1. Onishi, T. Quantum Computational Chemistry, Springer, Singapore, 2018.
2. Teixeira-Dias J.J.C., Molecular Physical Chemistry, Springer, Switzerland, 2017.
3. Leszczynski, J., Kaczmarek-Kedziera, A., Puzyn, T., G. Papadopoulos, M., Reis, H., K. Shukla, M. (Eds.), Handbook of Computational Chemistry, Springer, Switzerland, 2017
4. Lewars E.G., Computational Chemistry, 2nd. Ed. Springer, Germany, 2011.
5. Cuevas G., Cortés F., Introducción a la Química Computacional, Fondo de Cultura Económica, México, 2003.