

UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS DE GUATEMALA
FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS Y FARMACIA
ESCUELA DE QUÍMICA
DEPARTAMENTO DE FISICOQUÍMICA

PROGRAMA FUNDAMENTOS DE QUIMICA COMPUTACIONAL

INFORMACIÓN GENERAL

No. De Código:	Pendiente
Créditos:	4 créditos
Períodos	2 períodos de 1 hora de teoría semanal 4 períodos de 1 hora de laboratorio semanal
Semestre:	Primer Semestre de 2014
Ciclo:	Noveno
Requisitos:	Matemática V Fisicoquímica III Estadística
Carreras:	Licenciatura en Química
Docente:	Lic. Omar Ernesto Velásquez González
Período del Curso:	20 de enero a 16 de mayo de 2014
Horario:	Lunes, de 19:00 a 20:00 horas; Martes, de 18:00 a 20:00 horas; jueves, de 17:00 a 20:00 horas
Aulas:	Salón Pendiente

DESCRIPCIÓN DEL CURSO

El curso optativo de Modelación y Simulación Química tiene como objetivo completar los fundamentos científicos necesarios para abordar problemas prácticos desde un punto de vista teórico. Con esta intención se cubren 3 ejes principales: matemática para química cuántica, análisis de varianza para diseño de experimentos, e introducción al uso de recursos digitales para química. Debido a la naturaleza del curso, el estudiante quedaría en la capacidad de realizar un modelo formal y, de esta manera, soportar una investigación de manera más completa.

OBJETIVOS:

General

Que el estudiante sea capaz de realizar un modelo en Química formal y, de esta manera, soportar una investigación de manera teórica.

Específicos

Nivel Cognitivo

Que el estudiante

1. Utilice adecuadamente la notación de Dirac.
2. Utilice la teoría de variable compleja para la resolución de problemas matemáticos.
3. Utilice adecuadamente la métrica de los espacios de Hilbert.
4. Plantee algoritmos de manera gráfica.
5. Esquematice problemas reales para resolverse de manera digital.
6. Cuantifique y balancee los recursos digitales a modo de obtener la mayor eficiencia en la resolución de problemas.
7. Conozca el diseño experimental estadístico.

Nivel Psicomotriz

Que el estudiante

1. Desarrolle la notación de Dirac de manera sintética.
2. Haga diagramas que representen procesos y algoritmos.
3. Programe rutinas básicas de manera lineal y orientada a objetos.

4. Haga uso de paquetes de software para química, matemática y estadística.
5. Cree sus propios modelos de manera digital y los aplique a problemas reales.
6. Diseñe un experimento de una manera estadísticamente adecuada

Nivel Afectivo

1. Descubra la importancia de las herramientas teóricas para un buen resultado experimental.
2. Alcance la perspectiva adecuada para desarrollarse en áreas investigativas de carácter teórico.

METODOLOGÍA:

- Conferencias magistrales que estarán a cargo del profesor con una duración de 60 minutos c/u.
- Lectura y discusión de artículos científicos.
- Elaboración de rutinas y modelos para obtención de información de una investigación.
- Elaboración de investigaciones experimentales sencillas desde una perspectiva teórica.

CONTENDIDOS PROGRAMÁTICOS POR UNIDADES

Matemática

1. Álgebra Lineal Avanzada
2. Variable Compleja
3. Introducción a los espacios de Hilbert

Programación

1. Diagramas
2. Hardware
3. Software
4. Paquetes de Software para Química

Estadística

1. Experimentos comparativos simples
2. Introducción a los diseños factoriales

PROGRAMACIÓN ESPECÍFICA POR UNIDADES:

TÍTULO	DESCRIPCIÓN	CALENDARIZACION
Funciones Propias	<ul style="list-style-type: none">• Valores y vectores característicos• Matrices semejantes y diagonalización• Matrices Simétricas y Diagonalización Ortogonal• Forma Matricial de ecuaciones diferenciales.	27 y 28 de enero
Variable Compleja	<ul style="list-style-type: none">• Números Complejos• Plano Complejo• Forma Polar de los números complejos• Ecuaciones de Cauchy – Riemman.• Ecuación de Laplace• Función exponencial• Funciones Hiperbólica y Trigonométrica• Logaritmos.• Integrales de línea en el plano complejo• Teorema de la Integral de Cauchy• Fórmula de la Integral de Cauchy	29 de enero a 6 de febrero
Operadores y Notación de Dirac	<ul style="list-style-type: none">• Interpretación vectorial de la función de onda.• Ortonormalidad de las funciones de onda.• Conmutatividad.• Operadores Hermíticos.• Operadores Normales.• Construcción de operadores mecánico cuánticos	10 al 13 de febrero
Introducción a los espacios de Hilbert	<ul style="list-style-type: none">• Producto Interno• Teorema Pitagórico• Desigualdades de Bessel y Cauchy – Schwarz• Secuencias de Cauchy• Convergencia y complementariedad• Definición del Espacio de Hilbert• Aditividad, bases y dimensión	17 al 20 de febrero
Hardware	<ul style="list-style-type: none">• Partes básicas de un ordenador	24 de febrero

	<ul style="list-style-type: none"> • Periféricos 	
Software	<ul style="list-style-type: none"> • Historia • Arquitectura • Lenguajes/Estructura • Orientación a Objetos 	25 de febrero
Programación (Introducción)	<ul style="list-style-type: none"> • Algoritmos • Diagramas de Flujo • Unified Modeling Language (UML) 	27 de febrero al 4 de marzo
Programación (Estructuras)	<ul style="list-style-type: none"> • Entrada y Salida. • Tipos de variables • Estructuras condicionales • Funciones • Ciclos • Validación de Datos 	6 al 31 de marzo
Paquetes de Software para Química	<ul style="list-style-type: none"> • OpenBabel • Avogadro • Python • R • KNIME 	1 al 3 de abril
Experimentos Comparativos Simples	<ul style="list-style-type: none"> • Inferencias acerca de diferencias en las medias, diseño aleatorizado. • Inferencias acerca de diferencias en las medias, comparaciones pareadas. • Varianzas de las distribuciones normales. 	21 al 24 de abril
Introducción a los diseños factoriales	<ul style="list-style-type: none"> • Definiciones y principios básicos • La ventaja de los diseños factoriales • Diseño factorial de dos factores • Diseño factorial general • Ajuste de Curvas y superficies de Respuesta • Formación de Bloques en un diseño factorial • Modelos de regresión 	28 de abril al 6 de mayo

EVALUACIÓN

Descripción	Cantidad	Ponderación
Tareas	10	15 puntos
Discusión de artículos	3	15 puntos
Evaluaciones orales de contenido	5	10 puntos
Proyectos	2	30 puntos
Investigación	1	30 puntos

NOTA : Para promover el curso se requiere que la NOTA DE PROMOCIÓN sea de 61 puntos como mínimo, de acuerdo al Artículo No. 46 del Reglamento de Evaluación y Promoción Estudiantil de la Facultad de CC.QQ. y Farmacia.

BIBLIOGRAFÍA

Libros guía recomendados:

- Montgomery, D. C. (2001). *Design and analysis of experiments* (5th ed.). New York: John Wiley.
- Cohen, D. W. (1989). *An introduction to Hilbert space and quantum logic*. New York: Springer-Verlag.
- Downey, A., Meyer, C., & Elkner, J. (2002). *How to think like a computer scientist: learning with Python*. Wellsley, Mass.: Green Tea Press.
- Kreyszig, E. (1972). *Advanced engineering mathematics* (3d ed.). New York: Wiley.
- Levine, I. N. (1970). *Quantum chemistry*. Boston: Allyn and Bacon.
- Montgomery, D. C., & Runger, G. C. (1994). *Applied statistics and probability for engineers*. New York: John Wiley & Sons.
- Pilar, F. L. (2001). *Elementary Quantum Chemistry* (2nd ed.). New York [etc.: Dover.
- Szabo, A., & Ostlund, N. S. (1989). *Modern quantum chemistry: introduction to advanced electronic structure theory*. New York: McGraw-Hill.
- Venables, W. N., & Smith, D. M. (2013). *An introduction to R: a programming environment for data analysis and graphics*, version 3.0.2 (5th ed.). Bristol, England: Network Theory.

- Verzani, J. (2005). *Using R for introductory statistics*. Boca Raton: Chapman & Hall/CRC.

Documentos adicionales:

- Berthold, M. R., Cebron, N., Dill, F., Gabriel, T. R., Kötter, T., Meinl, T., et al. (2009). KNIME - The Konstanz Information Miner. *ACM SigKDD Explorations Newsletter*, 11(1), 26.
- Hanwell, M., Curtis, D., Lonie, D., Vandermeersch, T., Zurek, E., & Hutchinson, G. (2012). Avogadro: an advanced semantic chemical editor, visualization, and analysis platform. *Journal of Cheminformatics*, 4(1), 17.
- O'Boyle, N. M., & Hutchison, G. R. (2008). Cinfony – Combining Open Source Cheminformatics Toolkits Behind A Common Interface. *Chemistry Central journal*, 2(1), 24.
- O'Boyle, N. M., Banck, M., James, C. A., Morley, C., Vandermeersch, T., & Hutchison, G. R. (2011). Open Babel: An Open Chemical Toolbox. *Journal of Cheminformatics*, 3(1), 33.
- Oliphant, T. (2007). Python for Scientific Computing. *Computing in Science and Engineering*, 9(3), 10-20.