



**INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL**  
**SECRETARÍA DE INVESTIGACIÓN Y POSGRADO**

**DIRECCIÓN DE POSGRADO**

*FORMATO GUÍA PARA REGISTRO DE ASIGNATURAS*

Hoja 1 de 3

**I. DATOS DEL PROGRAMA Y LA ASIGNATURA**

1.1 NOMBRE DEL PROGRAMA: Doctorado en Nanociencias y Micro-Nanotecnología

1.2 COORDINADOR DEL PROGRAMA: \_\_\_\_\_

1.3 NOMBRE DE LA ASIGNATURA: Modelación Molecular

1.4 CLAVE: \_\_\_\_\_ (Para ser llenado por la SIP)

1.5 TIPO DE ASIGNATURA:

OBLIGATORIA

OPTATIVA

SEMINARIO

ESTANCIA

1.6 NÚMERO DE HORAS:

TEORÍA

PRACTICA

T-P

1.7 UNIDADES DE CRÉDITO:

1.8 FECHA DE LA ELABORACIÓN DEL PROGRAMA DE LA ASIGNATURA:

d

m

a

1.9 SESIÓN DEL COLEGIO DE PROFESORES  
EN QUE SE ACORDÓ LA IMPLANTACIÓN  
DE LA ASIGNATURA:

SESIÓN No.

FECHA:

d

m

a

1.10 FECHA DE REGISTRO EN SIP:

d

M

a

(Para ser llenado por la SIP)

**II. DATOS DEL PERSONAL ACADÉMICO**

2.1 COORD. ASIGNATURA: Juan Ignacio Rodríguez Hernández CLAVE: \_\_\_\_\_

2.2 PROF. PARTICIPANTE: Juan Ignacio Rodríguez Hernández CLAVE: \_\_\_\_\_

Fray de Landa Castillo Alvarado CLAVE: \_\_\_\_\_

Hoja 2 de 3

### III. DESCRIPCIÓN DEL CONTENIDO DEL PROGRAMA DE LA ASIGNATURA

#### III.1 OBJETIVO GENERAL:

Se espera que el alumno aprenda las principales metodologías modernas para la “modelación” computacional de la materia (moléculas, fulerenos, nanosistemas y materiales en bulto). Estas metodologías abordan el problema de estudio de la materia a nivel atómico y molecular con el objetivo de calcular sus propiedades físicas y químicas. Primeramente se introduce al alumno a la solución del problema cuántico (de n-cuerpos) de estructura electrónica, haciendo énfasis en la “Teoría de Funcionales de la Densidad” (DFT: “Density Functional Theory”). Esta metodología se introduce como una herramienta teórico-computacional para obtener las soluciones al problema electrónico, cuyas soluciones permiten introducir el concepto de enlace químico y estabilidad de la materia (nanométrica y en bulto), así como la obtención teórica de propiedades estructurales, electrónicas, ópticas y de respuesta (entre otras) de tales sistemas. En el curso también se introducen las teorías semiempíricas (o semiclásicas) de “Dinámica Molecular” y “Método de Monte Carlo”. Las clases teóricas son complementadas con tutoriales sobre el uso de programas de cómputo especializados. Al final del curso se espera que el alumno tenga un criterio firme para elegir la metodología a usar dependiendo del tipo de sistema a estudiar y las propiedades a calcular.

#### III.2 DESCRIPCIÓN DEL CONTENIDO

TEMAS Y SUBTEMAS	TIEMPO
<b>I. INTRODUCCIÓN</b> <span style="float: right;"><b>Total</b></span>	<b>8</b>
1.1 El problema general de “modelación” y “simulación” molecular computacional.	2
1.2 Métodos Cuánticos o de primeros principios.	2
1.3 Métodos Semiempíricos o Semiclásicos.	2
1.4 Cálculo de propiedades físicas y químicas.	2
1.5 Relación entre “tamaño” del sistema, “condiciones de frontera” y propiedades.	
<b>II. EL PROBLEMA MOLECULAR.</b> <span style="float: right;"><b>Total</b></span>	<b>14</b>
2.1 La ecuación de Shrödinger para una molécula.	4
2.2 Unidades atómicas.	2
2.3 Separación del problema nuclear.	4
2.4 La ecuación de Shrödinger electrónica.	4
2.5 Cálculo de estructura electrónica de moléculas, fulerenos, polímeros y nanoclusters.	
<b>III. LA APROXIMACIÓN THE HARTREE-FOCK</b> <span style="float: right;"><b>Total</b></span>	<b>25</b>
3.1 Introducción.	1
3.2 El principio variacional.	4
3.3 La aproximación de Hartree-Fock.	4
3.4 Las ecuaciones de Hartree-Fock.	4
3.5 Las ecuaciones de Roothaan.	4

3.6 Cálculo de propiedades de moléculas, fulerenos, polímeros y nanoclusters.	8
<b>IV. TEORÍA DE FUNCIONALES DE LA DENSIDAD (DFT: DENSITY FUNCTIONAL THEORY)</b>	<b>31</b>
<b>Total</b>	
4.1 Introducción.	1
4.2 Teorema de Hohenberg-Kohn.	4
4.3 La aproximación de Kohn-Sham	4
4.4 Las ecuaciones de Kohn-Sham	4
4.5 Ecuaciones de Kohn-Sham-Roothaan	6
4.6 Enlace Químico	6
4.7 Cálculo de propiedades de moléculas, fulerenos, polímeros y nanoclusters.	6
<b>V. DINÁMICA MOLECULAR.</b>	<b>26</b>
<b>Total</b>	
5.1 Dinámica Molecular Clásica.	4
5.2 Algoritmo de Verlet.	4
5.3 Clases de Potenciales.	2
5.4 Cálculo de estructuras estables.	4
5.5 Cálculo de propiedades termodinámicas.	4
5.6 Dinámica Molecular Cuántica.	4
5.7 Dinámica Molecular <i>versus</i> Mecánica Cuántica para sistemas nanométricos.	4
<b>VI. METODO DE MONTE CARLO</b>	<b>16</b>
6.1 El algoritmo de Metropolis.	4
6.2 Equilibrio y mediciones.	2
6.3 Cálculo de Propiedades.	4
6.4 Cálculo de Errores.	2
6.5 El Modelo de Ising.	4
<b>TOTAL</b>	<b>120 horas</b>

### III.3 BIBLIOGRAFIA UTILIZADA EN LA ASIGNATURA

- 1.- I. N. Levine, "*Quantum Chemistry*". Pearson Prentice Hall. Sixth edition, NJ, USA (2009).
- 2.- R. Parr and W. Yang, "*Density Functional Theory of Atoms and Molecules*". New York: Oxford University Press, Inc. (1989).
- 3.- P. W. Atkins, "*Molecular Quantum Mechanics*", Second Edition. Oxford University Press (1992).
- 4.- A. R. Leach, "*Molecular Modelling: Principles and Applications*". Second Edition. Pearson

