UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BAJA CALIFORNIA

COORDINACIÓN GENERAL DE FORMACIÓN BÁSICA
COORDINACIÓN GENERAL DE FORMACIÓN PROFESIONAL Y VINCULACIÓN UNIVERSITARIA
PROGRAMA DE UNIDAD DE APRENDIZAJE

I. DATOS DE IDENTIFICACIÓN

1. **Unidad Académica**: Facultad Ingeniería, Arquitectura y Diseño, Ensenada.
2. **Programa Educativo:** Ingeniero en Nanotecnología.
3. **Plan de Estudios:** 2019-2
4. **Nombre de la Unidad de Aprendizaje:** Modelado y Simulación de Nanomateriales
5. **Clave**: 33557
6. **HC:** 01 **HL:** 03 **HT:** 02 **HPC:** 00 **HCL:** 00 **HE:** 01 **CR:** 07
7. **Etapa de Formación a la que Pertenece**: Terminal
8. **Carácter de la Unidad de Aprendizaje**: Obligatoria
9. **Requisitos para Cursar la Unidad de Aprendizaje:** Ninguno

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BAJA CALIFORNIA
REGISTRADO
09 NOV 2018
REGISTRADO
COORDINACIÓN GENERAL DE FORMACIÓN BÁSICA

Equipo de diseño de PUA	**Firma**	**Vo.Bo. de Subdirector de Unidad Académica**	**Firma**
Enrique Efrén García Guerrero Emmanuel de la Cruz Piña		Humberto Cervantes De Ávila	

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BAJA CALIFORNIA
FACULTAD DE INGENIERÍA, ARQUITECTURA Y DISEÑO
ENSENADA, B.C.

Fecha: 08 de agosto de 2018

II. PROPÓSITO DE LA UNIDAD DE APRENDIZAJE

La unidad de aprendizaje Modelado y Simulación de Nanomateriales tiene como finalidad proporcionar al estudiante las herramientas computacionales básicas para realizar computación científica en el área de nanotecnología, como en el diseño de nuevos materiales, considera el cálculo de propiedades ópticas y electrónicas de átomos, moléculas y cristales y el modelado de fenómenos físicos, entre otros. Su utilidad se refleja en que el estudiante desarrollará habilidades y actitudes para promover el trabajo, la discusión y la crítica constructiva en comunidades de aprendizaje y científicas; el trabajo y la discusión en equipo; la argumentación y la exposición de resultados y conclusiones producto de trabajos de modelación y análisis; el autoestudio, la autogestión y la investigación, entre otras. Pertenece a la etapa terminal, con carácter de obligatorio y pertenece al área de Ingeniería Aplicada.

III. COMPETENCIA DE LA UNIDAD DE APRENDIZAJE

Aplicar los modelos y aproximaciones de las teorías de la física clásica y la mecánica cuántica en el estudio de propiedades de sistemas nanométricos (átomos, moléculas, cristales), a través de la utilización de algoritmos y paquetes de computo que den solución numérica a ecuaciones diferenciales de n-esimo grado, para interpretar las dinámicas de sistemas atómicos, con actitud crítica, honesta y proactiva en el trabajo colaborativo.

IV. EVIDENCIA(S) DE DESEMPEÑO

Entrega un compendio de los problemas resueltos en clase, taller y tareas extras, de forma analítica y numérica, donde se especifique:

- Planteamiento del problema
- Desarrollo detallado del procedimiento matemático empleado
- Interpretación del resultado obtenido.

Entrega un compendio que integre los reportes de cada práctica de laboratorio realizada, donde se especifique:

- Introducción
- Objetivo
- Metodología
- Recursos materiales y equipo
- Desarrollo
- Resultados y conclusiones
- Bibliografía.

V. DESARROLLO POR UNIDADES

UNIDAD I. Lenguajes de Programación y Modelado

Competencia:
Aplicar los diferentes entornos y plataformas de programación, para determinar propiedades en materiales, así como modelar un fenómeno físico, a través de la implementación de algoritmos computacionales específicos, con apertura al cambio, creativo, honesto y altamente participativo para el trabajo colaborativo.

Contenido: **Duración:** 4 horas

1.1. Modelado y simulación en ciencia de materiales.
1.2. Introducción a FORTRAN90, MatLab, Python y/o Julia.
1.3. Introducción al uso de GNUPLOT y Origin.
1.4. Solución de problemas con condiciones iniciales.
    1.4.1. Partícula clásica dentro de una caja unidimensional.
    1.4.2. Partícula en una caja bidimensional.
    1.4.3. Tiro parabólico.

UNIDAD II. Soluciones Numéricas de Ecuaciones Diferenciales

Competencia:
Aplicar los métodos convencionales de solución numérica de las Ecuaciones Diferenciales de n-ésimo orden, para describir el comportamiento físico del fenómeno que modelan, mediante algoritmos de solución en diferentes entornos computacionales, con honestidad, creatividad y apertura al cambio.

Contenido: **Duración:** 4 horas

2.1. Introducción a los métodos de diferencias finitas.
2.2. Método de Euler hacia delante
  2.2.1. Hacia delante.
  2.2.2. Hacia atrás.
  2.2.3. Central.
2.3. Método de Runge-Kutta
  2.3.1. Segundo orden.
  2.3.2. Tercer orden.
  2.3.3. Cuarto orden.
2.4. Ecuaciones diferenciales.
  2.4.1. Con condiciones iniciales.
  2.4.2. Con condiciones a la frontera.
2.5. Aplicaciones.
  2.5.1. Problema del Oscilador Forzado-Amortiguado.
  2.5.2. Cadenas de resortes y esferas.
  2.5.3. Descripción de campos de fuerza.
  2.5.4. Parametrización del campo de fuerza.

UNIDAD III. Teoría Cuántica

Competencia:
Resolver numéricamente la ecuación de Schrödinger, a través de los métodos de diferencias finitas y de Runge-Kutta, para identificar que los estados de energía se encuentran íntimamente ligados a las condiciones de frontera y que pueden ser obtenidos de manera aproximada por de la teoría de perturbaciones y el método variacional, con honestidad, creatividad y tolerancia en el trabajo en equipo.

Contenido: **Duración:** 5 horas

3.1. Diferencias entre la teoría clásica y la cuántica.
3.2. Fundamentos de mecánica cuántica.
3.3. La partícula en la caja de paredes infinitas.
3.4. Doble pozo simétrico con paredes infinitas.
3.5. Oscilador armónico.
3.6. El átomo de Hidrógeno.
3.7. Teoría de perturbaciones.

UNIDAD IV. Temas Selectos de Métodos Computacionales

Competencia:
Identificar que los átomos multi-electrónicos, así como las moléculas son sistemas que involucran la interacción de muchos cuerpos, para determinar sus niveles de energía y construir funciones prueba, a través de las teorías de Hartree-Fock y DFT, con equidad, honestidad y actitud crítica e innovadora.

Contenido: **Duración:** 3 horas

4.1. Principios básicos de Mecánica Molecular.
4.2. El problema de muchos cuerpos y DFT.
4.3. Método de variaciones.
4.4. Aproximación de Combinación Lineal de Orbitales Atómicos.
4.5. Átomo de Helio y las fuerzas de intercambio.
4.6. Teoría de Hartree y Hartree-Fock.
4.7. Moléculas simples: H.

VI. ESTRUCTURA DE LAS PRÁCTICAS DE TALLER				
No. de Práctica	**Competencia**	**Descripción**	**Material de Apoyo**	**Duración**
UNIDAD I				
1	Resolver analíticamente problemas de física clásica, para identificar las ecuaciones que describen el fenómeno, a través de las leyes de Newton y las leyes de la conservación de la energía, con creatividad, honestidad y participativo en el trabajo colaborativo.	**Lenguajes de Programación y Modelado** Resuelve analíticamente problemas elementales de la física clásica como, tiró parabólico, colisión entre partículas, etc. Coteja los resultados en equipo. Entrega la solución del problema.	Pizarrón, marcadores, animaciones numéricas, software de aplicación y videos.	4 horas
2	Resolver analíticamente problemas de física clásica descritos por ecuaciones diferenciales de primer orden, para identificar los métodos de solución analítica, a través de las técnicas y procedimientos matemáticos convencionales, con honestidad y tolerancia para el trabajo en equipo.	Resuelve analíticamente ecuaciones diferenciales de primer orden como el caso de la descarga de un capacitor, entre otros. Coteja los resultados en equipo. Entrega la solución del problema.	Pizarrón, marcadores, animaciones numéricas, software de aplicación y videos.	4 horas
UNIDAD II				
3	Resolver analíticamente problemas de física clásica descritos por ecuaciones diferenciales de segundo orden, para identificar los métodos de solución analítica, a través de las técnicas y procedimientos matemáticos convencionales, con creatividad, honesto y actitud proactiva en el trabajo en equipo.	**Soluciones Numéricas de Ecuaciones Diferenciales.** Resuelve analíticamente ecuaciones diferenciales de segundo orden como el movimiento del péndulo simple, del oscilador forzado amortiguado, entre otros. Coteja los resultados en equipo. Entrega la solución del problema.	Pizarrón, marcadores, animaciones numéricas, software de aplicación y videos.	4 horas
4	Resolver por series de potencia	Resuelve empleando series de	Pizarrón, marcadores,	4 horas

	problemas de física clásica descritos por ecuaciones diferenciales, para identificar los métodos de solución por series, a través de las técnicas y procedimientos matemáticos convencionales, con creatividad y tolerancia para trabajar en equipo.	potencia ecuaciones diferenciales de segundo orden como el movimiento del péndulo simple, del oscilador forzado amortiguado, entre otros. Coteja los resultados en equipo. Entrega la solución del problema.	animaciones numéricas, software de aplicación y videos.	
UNIDAD III				
5	Modelar analíticamente la molécula di-atómica, para describir su dinámica y el comportamiento de la energía potencial asociada al sistema, a través de la uso de ecuaciones diferenciales, con orden, actitud crítica y honesta.	**Teoría Cuántica.** Modela analíticamente una molécula di-atómica por medio de dos esferas unidas a través de un resorte, para estudiar su energía y movimiento atómico. Resuelve la ecuación diferencial para el movimiento armónico simple en relación a la molécula. Coteja los resultados en equipo. Entrega la solución del problema.	Pizarrón, marcadores, animaciones numéricas, software de aplicación y videos.	6 horas
6	Modelar analíticamente moléculas triatómicas mediante tres esferas unidas por dos resortes, para describir su dinámica y comportamiento de la energía potencial, a través del empleo de ecuaciones diferenciales acopladas al sistema, con creatividad, honestidad y tolerancia para trabajar en equipo.	Calcula analíticamente la energía y geometría de moléculas poli-atómicas constituidas por más de dos átomos, a través de la implementación de los campos de fuerza en mecánica molecular. Coteja los resultados en equipo. Entrega la solución del problema.	Pizarrón, marcadores, animaciones numéricas, software de aplicación y videos.	4 horas
UNIDAD IV				
7	Resolver analíticamente la ecuación de Schrödinger unidimensional independiente del tiempo, para identificar diferentes soluciones a la	**Temas Selectos de Métodos Computacionales.** Resuelve la ecuación de Schrödinger independiente del	Pizarrón, marcadores, animaciones numéricas, software de aplicación y videos.	3 horas

	ecuación, a través de los postulados de la mecánica cuántica, con actitud innovadora, creativo y honesto.	tiempo para la partícula en una caja cuadrada de paredes infinitas y la partícula en un doble pozo simétrico, empleando los postulados de la mecánica cuántica. Coteja los resultados en equipo. Entrega la solución del problema.		
8	Modelar orbitales moleculares, para identificar el tipo de orbital, a través de la combinación lineal de orbitales atómicos, con honestidad, creatividad, orden y actitud colaborativa.	Modela orbitales moleculares a partir de combinaciones lineales de orbitales atómicos. Considera la ecuación de onda como el modelo del orbital e identifica interferencias constructivas o destructivas definiendo si es enlazante o antienlazante. Coteja los resultados en equipo. Entrega la solución del problema.	Pizarrón, marcadores, animaciones numéricas, software de aplicación y videos.	3 horas

VI. ESTRUCTURA DE LAS PRÁCTICAS DE LABORATORIO				
No. de Práctica	**Competencia**	**Descripción**	**Material de Apoyo**	**Duración**
UNIDAD I				
1	Resolver numéricamente problemas de física clásica, para describir el comportamiento del fenómeno, a través de las leyes de Newton y las leyes de la conservación de la energía, con creatividad, honestidad y actitud colaborativa.	**Lenguajes de Programación y Modelado.** Resuelve numéricamente problemas elementales de la física clásica como tiró parabólico, colisión entre partículas, etc., basándose en la generación de códigos que incluyan loops. Los códigos deberán ser codificados en Fortran90, MatLab o Python para generar archivos donde se contenga la solución, y poder graficar en GNUplot u Origin. Estructura y entrega un reporte en el que describa la física empleada, los métodos numéricos empleados y el código desarrollado, enfatizando sus observaciones y conclusiones.	Fortran90, MatLab o Python, GNUPLOT, Origin o similar.	6 horas
2	Resolver numéricamente problemas de física clásica descritos por ecuaciones diferenciales de primer orden, para identificar los métodos numéricos de solución, a través de los algoritmos de solución convencionales, con	Resuelve numéricamente ecuaciones diferenciales de primer orden como la que describe la descarga de un capacitor, entre otros. Estructura de manera discreta dichas	Hoja de trabajo, Fortran90, GNUPLOT, Origin o similar.	6 horas

	creatividad, honestidad y actitud proactiva para el trabajo en equipo.	ecuaciones mediante el método de Verlet y las evalúa numéricamente mediante un programa de cómputo, el cual debe ser en código FORTRAN90 para obtener la solución del problema como función del tiempo. Los resultados son visualizados a través de GNUPLOT. Estructura y entrega un reporte en formato de artículo científico, en el que describa la física empleada, los métodos numéricos empleados y el código desarrollado, enfatizando sus observaciones y conclusiones.		
UNIDAD II				
3	Resolver numéricamente problemas de física clásica descritos por ecuaciones diferenciales de primer y segundo orden, para identificar los métodos numéricos de solución, a través de los algoritmos de Verlet o Euler, con orden, honestidad y creatividad.	**Soluciones Numéricas de Ecuaciones Diferenciales.** El estudiante resuelve numéricamente las ecuaciones diferenciales de primer y segundo orden que describen el movimiento del péndulo simple, el oscilador forzado amortiguado, entre otros, mediante el método numérico de Verlet o Euler. Implementa un programa en FORTRAN90 que genere la solución del problema como función del tiempo. Los resultados se deben visualizar a través de GNUPLOT y posteriormente comparados con los que se obtuvieron a través del método de Verlet o Euler. Se analiza la rapidez relativa con la	Hoja de trabajo, Fortran90, GNUPLOT, Origin o similar.	6 horas

		que converge cada uno de los métodos. El alumno estructura y entrega un reporte en formato de artículo científico, en el que describa la física empleada, los métodos numéricos empleados y el código desarrollado, enfatizando sus observaciones y conclusiones.		
4	Resolver numéricamente problemas de física clásica descritos por ecuaciones diferenciales de segundo orden, para identificar los métodos numéricos de solución, a través de los algoritmos de Runge-Kuta de segundo y cuarto orden, con disciplina, honestidad y creatividad.	Resuelve numéricamente las ecuaciones diferenciales de segundo orden que describen el movimiento del péndulo simple, el oscilador forzado amortiguado, entre otros, mediante los métodos Runge-Kutta de segundo y cuarto orden. Implementa un programa en FORTRAN90 que genere la solución del problema como función del tiempo. Los resultados se deben visualizar a través de GNUPLOT y posteriormente comparados con los que se obtuvieron a través del método de Verlet. Se analiza la rapidez relativa con la que converge cada uno de los métodos. Estructura y entrega un reporte en formato de artículo científico, en el que describa la física empleada, los métodos numéricos empleados y el código desarrollado, enfatizando sus observaciones y conclusiones.	Hoja de trabajo, Fortran90, GNUPLOT, Origin o similar.	6 horas
UNIDAD III				
5	Modelar la molécula di-atómica, para describir su dinámica y	**Teoría Cuántica.** Resolver la ecuación del	Material por analizar mediante TEM e información	9 horas

	comportamiento de la energía potencial, a través de ecuaciones diferenciales del oscilador armónico, con honestidad, proactividad, orden y creatividad	movimiento de manera numérica, asociada a una molécula di-atómica por medio de dos esferas unidas a través de un resorte, para estudiar su energía y el movimiento atómico. Se implementa un programa en FORTRAN90, en donde implemente el método de Verlet o el método de Runge-Kutta de cuarto orden. Los resultados serán visualizados mediante GNUPLOT. El alumno estructura y entrega un reporte en formato de artículo científico, en el que describa la física empleada, los métodos numéricos empleados y el código desarrollado, enfatizando sus observaciones y conclusiones.	de síntesis. Equipo de laboratorio. Micrografías. Software de análisis de imágenes.	
6	Modelar moléculas triatómicas mediante tres esferas unidas por dos resortes, para describir su dinámica y comportamiento de la energía potencial, a través del empleo de ecuaciones diferenciales acopladas al sistema, con actidud creativa e innovadora.	Calcula la energía y geometría de moléculas poli-atómicas constituidas por más de dos átomos, a través de la implementación de los campos de fuerza en mecánica molecular. Se emplea el programa de cómputo especializado Avogadro. Estructura y entrega un reporte en formato de artículo científico, en el que describa la física empleada, los métodos numéricos empleados y el código desarrollado, enfatizando sus observaciones y conclusiones.	Hoja de trabajo y Software Avogadro.	6 horas
UNIDAD IV				
7	Resolver numéricamente la ecuación	**Temas Selectos de Métodos**	Hoja de trabajo, Fortran90,	6 horas

	de Schrödinger unidimensional independiente del tiempo, para identificar los métodos numéricos de solución a la ecuación, a través de los algoritmos de Runge-Kuta o Valet, con orden, honestidad y creatividad.	**Computacionales.** Implementar programas de cómputo para resolver la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para la partícula en una caja cuadrada de paredes infinitas y la partícula en un doble pozo simétrico. Se emplea el método del disparo y el método de Verlet o Runge-Kutta para obtener las eigenenergías y las eigenfunciones correspondientes. Se aplica la condición de normalización a la solución obtenida para que la probabilidad de encontrar a la partícula en todo el espacio sea igual a uno. Estructura y entrega un reporte en formato de artículo científico, en el que describa la física empleada, los métodos numéricos empleados y el código desarrollado, enfatizando sus observaciones y conclusiones.	Gnuplot, OriginLab o equivalente.	
8	Modelar orbitales moleculares, para describir su dinámica y comportamiento, a través de la solución a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo utilizando el método de Hartree-Fock, con actidud innovadora, honestidad y proactividad para el trabajo colaborativo.	Resuelve la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo a través del método de Hartree-Fock. Para ello se escogerá la base en la que se desea expandir la función de prueba a través de la cual se calcularán los orbitales cuánticos del sistema. Los cálculos se llevarán a cabo mediante el software de computo GAMESS. Sin embargo, para visualizar los orbitales resultantes, así como espectros de vibración se utilizará	Software GAMESS y Avogadro.	3 horas

		el programa Avogadro. Los resultados obtenidos se reportarán en un escrito tipo artículo científico.		

VII. MÉTODO DE TRABAJO

Encuadre: El primer día de clase el docente debe establecer la forma de trabajo, criterios de evaluación, calidad de los trabajos académicos, derechos y obligaciones docente-alumno.

Estrategia de enseñanza (docente)
Expondrá los temas centrales del curso y resolverá problemas típicos a manera de ejemplo en metodología, análisis y manejo matemático e interpretación física. Se apoyará en algunos casos de algunas simulaciones numéricas y videos cortos, a manera de conceptualizar conceptos y reforzar ideas en los estudiantes.

Taller: A partir de la información que se proporcione de problemas específicos, el estudiante debe: i) visualizar e interpretar el requerimiento solicitado, ii) plasmar una representación gráfica de lo solicitado, iii) planear una estrategia que le permita ejecutar un desarrollo matemático, a fin de obtener y/o proponer un resultado, iv) analizar e interpretar el resultado obtenido para validar si cumple los requerimientos solicitados, v) cotejar sus resultados en su equipo de trabajo, vi) exponer sus resultados frente al grupo y vii) entregar las soluciones de los problemas al finalizar el taller como evidencias.

Laboratorio:
A partir de la información que se proporcione para el desarrollo de las prácticas de laboratorio, el estudiante debe: i) interpretar e implementar el requerimiento solicitado, ii) a partir de un diagrama a bloques plasmar una representación gráfica de lo solicitado, iii) planear una estrategia que le permita ejecutar la implementación a fin de obtener lo solicitado, iv) analizar e interpretar el resultado obtenido para validar si cumple los requerimientos solicitados, v) elaborar un reporte de la práctica experimental solicitada con los requerimientos en formato y contenidos solicitados y vi) entregar el reporte en formato de artículo científico.

VIII. CRITERIOS DE EVALUACIÓN

La evaluación será llevada a cabo de forma permanente durante el desarrollo de la unidad de aprendizaje de la siguiente manera:

Criterios de acreditación

- 80% de asistencia para tener derecho a examen ordinario y 70% de asistencia para tener derecho a examen extraordinario de acuerdo al Estatuto Escolar artículos 71 y 72.
- Calificación en escala del 0 al 100, con un mínimo aprobatorio de 60.

Criterios de evaluación

- 4 exámenes parciales…… 30%
- Participación en clase……... 10%
- Evidencia de desempeño 1(Compendio de problemas)……..... 20%
  (El compendio de problemas comprende los talleres que representa un 10% y las tareas10%)
- Evidencia de desempeño 2 (Compendio de prácticas de laboratorio)..... 40%

Total…….. 100%

IX. REFERENCIAS

Básicas

Chapman, S. (2017). *Fortran 90/95 for Scientists and Engineers.* United States of America. CBS Publishers & Distributors PVT. LTD.

Collins, R. (1999). *Mathematical Methods for Physicists and Engineers*. United States of America. Dover Publications, INC. [clásica]

Cramer, C. J. (2004). *Essentials of computational chemistry: theories and models*. Unites States of America. John Wiley & Sons. [clásica]

Lewars, E. G. (2011). *Computational chemistry: introduction to the theory and applications of molecular and quantum mechanics*. United States of America. SpringerScience& Business Media. [clásica]

Press, W., Vetterling, W., Teukolsky, S., & Flanney, B. (1992). *Numerical Recipes in Fortran. The Art of Scientific Computing.* United States of America. Cambridge. [clásica]

Complementarias

Electronic Arts. Software Origin. Estados Unidos.

Gustafsson, B. (2011). *Fundamentals of Scientific Computing (Vol. 8).* United States of America. SpringerScience& Business Media. [clásica]

International Business Machines Corporation. Software Fortran. Estados Unidos.

National Resources for Computations in Chemistry. Software GAMESS. Recuperado de: GAMESS http://www.msg.ameslab.gov/gamess/

Software Avogadro. Recuperado de: http://avogadro.cc/wiki/Main_Page.

X. PERFIL DEL DOCENTE

El docente que imparta el curso de Modelado y Simulación de Nanomateriales, requiere título de licenciatura en el área de ciencias exactas. De preferencia con posgrado en ciencias exactas o ingeniería.

Experiencia laboral y docente sugerida de mínimo cinco años. Debe contar con experiencia impartiendo asignaturas de matemáticas, física o asignaturas afines. Así como tener habilidad para conducir a los estudiantes en la apropiación del conocimiento a través de preguntas que lleven a la reflexión y al análisis. Tener conocimientos de las aplicaciones, paqueterías, lenguajes y plataformas computacionales actuales que realicen cálculos matemáticos y herramientas de visualización. Es deseable que cuente con experiencia en la aplicación de los contenidos a situaciones reales para despertar el interés y la motivación entre los estudiantes.