FITXA IDENTIFICATIVA

Dades de l'Assignatura	
Codi	34218
Nom	Química computacional
Cicle	Grau
Crèdits ECTS	4.5
Curs acadèmic	2015 - 2016

Titulació/titulacions

Titulació	Centre	Curs	Període
1108 - Grau de Química	Facultat de Química	4	Primer quadrimestre

Matèries

Titulació	Matèria	Caràcter
1108 - Grau de Química	15 - Química Física Aplicada	Optativa

Coordinació

Nom	Departament
TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO	315 - Química Física

RESUM

DESCRIPTORS: Models teòrics i simulació computacional. Mecànica molecular. Dinàmica molecular. Química quàntica. Càlcul de propietats. Aplicacions.

Juntament amb la teoria i l'experiment, la simulació (modelització) és el tercer pilar del coneixement científic. Des de la dècada dels 90, l'evolució de la informàtica ha permès la incorporació útil i efectiva de la modelització a l'entorn químic: la química computacional.

La química computacional és un àrea del coneixement multidisciplinària. Hi convergeixen informàtica i documentació, la matemàtica (optimització, àlgebra d'operadors, càlcul, equacions diferencials, etc.) la física i la química física, la química quàntica, la bioquímica, les químiques orgànica, inorgànica i analítica i fins i tot l'enginyeria. Es pretén, doncs, donar una visió global de la química des de la perspectiva de la modelització com a eix vertebrador de tots els coneixements adquirits durant els estudis.

CONEIXEMENTS PREVIS

Relació amb altres assignatures de la mateixa titulació

No heu especificat les restriccions de matrícula amb altres assignatures del pla d'estudis.

Altres tipus de requisits

PRERREQUISITS: Enllaç químic i estructura de la matèria, àlgebra lineal, matemàtiques, càlcul numèric, fonaments d'informàtica, càlcul diferencial, quimiometria, química física II, química inorgànica, bioquímica, química orgànica (avançada).

CONEIXEMENTS PREVIS: Els impartits en les assignatures prerequisit, especialment els adquirits com a fonaments de matemàtiques, estadística, optimització, mecànica quàntica i espectroscòpia.

COMPETÈNCIES

1108 - Grau de Química

- Desenvolupar capacitat d'anàlisi, síntesi i raonament crític.
- Demostrar capacitat inductiva i deductiva.
- Demostrar capacitat de gestió i direcció, esperit emprenedor, iniciativa, creativitat, organització, planificació, control, lideratge, presa de decisions i negociació.
- Resoldre problemes de forma efectiva.
- Demostrar capacitat de treball en equip incloent equips de caràcter interdisciplinari i en un context internacional.
- Demostrar habilitat per a transmetre informació, idees, problemes i solucions tant a un public especialitzat com no especialitzat i utilitzant si escau les tecnologies de la informació.
- Comprometre's amb l'ètica, els valors d'igualtat i la responsabilitat social com a ciutadà i com professional.
- Adquirir una sensibilitat permanent per la qualitat i el medi ambient, el desenvolupament sostenible i la prevenció de riscos laborals.
- Demostrar que coneix els aspectes principals de terminologia química, nomenclatura, convenis i unitats.
- Demostrar que coneix les característiques i el comportament dels diferents estats de la matèria i les teories usades per descriure'ls.
- Demostrar que coneix els tipus principals de reacció química i les seues característiques principals associades.
- Demostrar que coneix els principis de la mecànica quàntica i l'aplicació a la descripció de l'estructura i de les propietats d'àtoms i molècules.

- Demostrar que coneix la metrologia dels processos químics, incloent-hi la gestió de qualitat.
- Relacionar les propietats macroscòpiques i propietats d'àtoms i molècules individuals, incloent-hi macromolècules (naturals i sintètiques), polímers, col·loides i altres materials.
- Demostrar que coneix l'estructura i la reactivitat de les classes principals de biomolècules i la química dels processos biològics principals.
- Demostrar el coneixement i la comprensió dels fets essencials, dels conceptes, dels principis i de les teories relacionades amb les àrees de la química.
- Resoldre problemes qualitatius i quantitatius segons models desenvolupats prèviament.
- Avaluar, interpretar i sintetitzar les dades i la informació Química.
- Manipular amb seguretat els productes químics.
- Manejar la instrumentació química utilitzada en les diferents àrees de la Química.
- Interpretar les dades procedents d'observacions i mesures en el laboratori en termes de la seua significació i de les teories que la sustenten.
- Valorar els riscos en l'ús de substàncies químiques i procediments de laboratori.
- Relacionar teoria i experimentació.
- Reconèixer i valorar els processos químics en la vida diària.
- Comprendre els aspectes qualitatius i quantitatius dels problemes químics.
- Desenvolupar metodologies sostenibles i respectuoses amb el medi ambient.
- Relacionar la química amb altres disciplines.
- Que els estudiants tinguen la capacitat d'arreplegar i interpretar dades rellevants (normalment dins de la seua àrea d'estudi) per emetre judicis que incloguen una reflexió sobre temes rellevants d'índole social, científica o ètica.
- Que els estudiants puguen transmetre informació, idees, problemes i solucions a un públic tant especialitzat com no especialitzat.
- Que els estudiants hagen desenvolupat aquelles habilitats d'aprenentatge necessàries per a emprendre estudis posteriors amb un alt grau d'autonomia.

RESULTATS DE L'APRENENTATGE

1.- Demostrar capacitat per a distingir els dominis d'aplicació de les diferents teories, mètodes i models de la química computacional (CG1, CG10, CE3, CE5, CE11, CE12, CE14, CE22, CT3)

2.- Demostrar capacitat per a seleccionar el mètode adequat al tipus de problema químic i conèixer els errors previstos (CG3, CG7,CE12, CE13, CE14)

3.- Demostrar capacitat per a reconèixer els efectes quimicofísics que són tinguts en compte i són necessaris en els càlculs i simulacions de compostos i reaccions químiques (CG1, CE3, CE12,CE13,CE24, CT3)

4.- Demostrar coneixement actualitzat de l'estat de les aplicacions informàtiques ("programari") de càlcul i simulació de major ús en química computacional i els seus principals "problemes diana" ("target problems") (CG1, CG7, CE1, CE11, CT3)

5.- Demostrar capacitat per a produir informació computacional (dades d'entrada ("input"), formats usuals en les aplicacions de química computacional…) a partir de dades químiques (fórmules empíriques, moleculars o estructurals, simetria molecular…) (CG3, CG4, CG7, CE1, CE10, CE13, CE14, CE20, CT3)

6.- Demostrar capacitat per a realitzar simulacions computacionals bàsiques d'estructures moleculars, propietats moleculars i reaccions químiques en fase gas (CG3, CG7, CE3, CE4, CE11, CE13, CT3)

7.- Demostrar capacitat per a realitzar simulacions computacionals bàsiques en sistemes infinits, mitjans condensats o entorns biològics (CG3, CG6, CG7, CE3, CE11, CE13, CT3)

8.- Demostrar capacitat per a analitzar i valorar els resultats de les simulacions computacionals (CG1, CG2, CG3, CG7, CE11, CE23, CE24, CT3)

DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

1. Familiarització amb l'entorn de càlcul

Dues sessions d'1,5 hores cadascuna:
Química computacional
L'entorn de treball: Linux
Energia potencial molecular
Especificació de la geometria molecular: matriu-Z
L'input de Gaussian

2. Hartree-Fock (I)

Una sessió d'1,5 hores
Equacions de Hartree-Fock (HF)
Hamiltonià molecular
Funcions polielectròniques i monoelectròniques.
Energia molecular: Integrals de core, de Coulomb i d'intercanvi

Regles de Slater
Operadors de Coulomb i d'intercanvi
Obtenció dels espín-orbitals òptims: Teorema de Brillouin
Operador de Fock: Equacions de HF
Equacions canòniques de HF

3. Hartree-Fock (II)

Una sessió d'1,5 hores
Sentit físic de les solucions de les equacions de HF
Integrals de core, de Coulomb i d'intercanvi
Orbitals ocupats i virtuals
Energia dels orbitals i energia molecular
Teorema de Koopmans

4. Hartree-Fock (III)

Una sessió d'1,5 hores
HF restringit per sistemes en capa tancada: Equacions de Roothaan
HF en capa tancada: Espín-orbitals restringits
Introducció d'una base: Equacions de Roothaan
La densitat de càrrega
Expressió de la matriu de Fock
Ortogonalització de la base
Procediment SCF
Valors esperats i anàlisi de població

5. Hartree-Fock (IV)

Una sessió de 1,5 hores
HF no restringit per sistemes en capa oberta: Equacions de Pople-Nesbet
HF en capa oberta: Espín-orbitals no restringits
Introducció duna base: Equacions de Pople-Nesbet
Matrius de densitat no restringides
Expressió de les matrius de Fock
Solució de les equacions SCF no restringides
El problema de la dissociació i la seua solució no restringida: la molècula H2 com a exemple

6. Teoria del funcional de la densitat

Una sessió d'1,5 hores
Teoria del funcional de la densitat
Els principis bàsics de la teoria del funcional de la densitat (DFT)
L'aproximació de Kohn-Sham
Aplicacions de la DFT
Fortaleses i febleses de la DFT

7. Mètodes post HF (I)

1 Sessió d'1,5 hores
La correlació electrònica
Correlació electrònica
Propietats formals dels mètodes:
Extensivitat
Consistència amb la mida
N-dependència
El paper de les configuracions doble i simplement excitades en la funció d'ona
Teoria de pertorbacions Rayleigh-Schrödinger
Teoria de pertorbacions de molts cossos (MBPT)

8. Mètodes post HF (II)

Una sessió d'1,5 hores
Mètodes de càlcul de la correlació electrònica
Mètodes Moller-Plesset MP2 i MP4
Grau d'excitació i ordre de pertorbació
Interacció de configuracions. El problema de la manca de consistència amb la grandària.
Teoria de Coupled Cluster

9. Interaccions intermoleculars

Una sessió de 1,5 hores
Interaccions intermoleculars
Introducció a les interaccions intermoleculars
Interaccions atractives
Interaccions repulsives
Interacció total i models simplificats

10. Mecànica Molecular

Una sessió d'1,5 hores
Mecànica molecular
Justificació de la mecànica molecular (MM)
Termes energètics
Parametrització d'un camp de força i exemples

11. Dinàmica Molecular

Una sessió d'1,5 hores
Dinàmica molecular
Justificació dels mètodes de simulació
Definició del sistema: condicions de contorn
Dinàmica molecular

12. Energia i estructura electrònica

Una sessió de tres hores
Energies de ionització i afinitats electròniques d'àtoms
Corbes de dissociació: HCl i HH
Visualització de la densitat electrònica i orbitals moleculars: età, etè, etí.
Conceptes: Càlcul HF i funcions de base

13. Optimització d'estructures moleculars

Dues sessions de tres hores cadascuna
Optimització d'una funció: Mètodes.
Estructures estacionàries. Classificació.
Optimització d'estructures HF. Efecte de la base.
Mètodes de funcional de la densitat
Optimització amb mètodes DFT
Corbes d'energia potencial
Estructures estacionàries

14. Càlculs espectroscòpics

Una sessió de tres hores
Espectroscòpia rotacional, vibracional i electrònica.
Modes normals
Termoquímica
Conceptes: transicions entre nivells energètics. Funcions de partició, propietats termodinàmiques.

15. Reactivitat química

Una sessió de tres hores
Superfície d'energia potencial (SEP)
Estat de transició
Camí de mínima energia
Teoria de l'estat de transició
Càlcul de la SEP de la reacció química F- + CH3Cl
Càlcul de la constant de velocitat
Localització directa d'estats de transició

16. Efectes del dissolvent sobre processos químics

Una sessió de tres hores
Models discret i continu
Efecte del dissolvent sobre l'equilibri tautomèric
Efecte del dissolvent sobre l'equilibri conformacional
Efecte del dissolvent sobre la reactivitat química
Conceptes: interaccions intermoleculars.

17. Càlculs de Dinàmica Molecular

Una sessió de tres hores
Introducció a la descripció de grans sistemes
Camps de força. El cas de l'aigua.
Dinàmica molecular de l'aigua líquida. Funció de distribució radial i nombre de coordinació.
DM de dissolucions aquoses. Coeficient de difusió.
DM de biomolècules. Plegament de proteïnes.
Conceptes: espai configuracional.

18. Aplicacions

Dues sessions de tres hores cadascuna.
Desenvolupament de dos petits projectes en els quals els estudiants apliquen els conceptes i els mètodes que s'han explicat en els continguts del curs en el seu conjunt.

VOLUM DE TREBALL

ACTIVITAT	Hores	% Presencial
Pràctiques en aula informàtica	36,00	100
Tutories reglades	9,00	100
Elaboració de treballs individuals	10,00	0
Estudi i treball autònom	30,00	0
Lectures de material complementari	2,50	0
Preparació d'activitats d'avaluació	10,00	0
Preparació de classes de teoria	10,00	0
Preparació de classes pràctiques i de problemes	5,00	0
TOTAL	**112,50**	

METODOLOGIA DOCENT

Totes les activitats presencials es faran a l'aula d'informàtica.

Sessions pràctiques: Són vuit sessions pràctiques de tres hores. Consisteixen en una primera part, d'una aproximada de 30 minuts, en la qual el professor explica de forma resumida els fonaments i les tècniques necessàries per a l'execució de la pràctica. En una segona part, d'una durada aproximada de 2,5 hores, es desenvolupa la pràctica usant els paquets informàtics adequats. Corresponen a les unitats temàtiques UT1 i des de la UT12 fins a la UT16.

Està previst que l'alumne acabe de forma autònoma el treball pràctic de cada sessió invertint-hi unes 16 hores de les 30 de treball autònom. La conclusió de la pràctica consisteix a acabar els càlculs i a redactar un breu informe sobre els resultats, que s'ha de lliurar en el termini màxim d'una setmana. La dedicació mitjana de l'alumne és de dues hores de treball autònom per sessió.

Amb l'objectiu que l'alumne puga disposar per al seu treball autònom d'exactament el mateix conjunt de programes que s'usen a l'aula d'ordinadors, les pràctiques es faran utilitzant un disc virtual que conté el sistema operatiu i tots els programes de càlcul necessaris en l'assignatura, del qual els alumnes disposaran d'una còpia.

Sessions de fonamentació: Són deu sessions teoricopràctiques d'una hora de duració en les quals s'exposaran els conceptes fonamentals de la química computacional i la seua aplicació als mètodes de càlcul. Corresponen a les unitats temàtiques UT2 a UT11.

Seminaris: Són deu sessions de 30 minuts que es fan a continuació de cada sessió de fonamentació, en les quals els estudiants, individualment o per parelles, exposaran aspectes complementaris del mateix tema, com ara desenvolupaments d'equacions o avaluacions crítiques de l'aplicació dels mètodes. Els temes s'assignaran als estudiants el primer dia de curs. Corresponen a les unitats temàtiques UT2 a UT11.

Treballs pràctics personalitzats: En les dues darreres sessions pràctiques a l'aula d'informàtica, els estudiants hauran de desenvolupar dos petits projectes de càlcul utilitzant el conjunt dels conceptes i mètodes del curs. Està previst que l'alumne acabe de forma autònoma el treball pràctic de cada sessió invertint-hi unes 14 hores, la resta de les 30 de treball autònom. La conclusió dels projectes consisteix a acabar els càlculs i a redactar un informe sobre els resultats, que s'ha de lliurar en el termini màxim d'una setmana. La dedicació mitjana de l'alumne és de set hores de treball autònom per sessió. Corresponen a la unitat temàtica UT17.

AVALUACIÓ

Per a l'avaluació de l'assignatura *Química computacional* es valoraran:

- Prova consistent en la realització d'un treball pràctic i la seua exposició oral: 60%.
- Avaluació de la participació en els seminaris, especialment del material elaborat i de les exposicions orals: 10%.
- Avaluació dels informes i les memòries corresponents a les sessions pràctiques: 20%.
- Avaluació contínua de cada alumne, basada en l'assistència regular a les classes i a les activitats presencials, la participació i el grau de participació en el procés d'ensenyament-aprenentatge: 10%.

Per ser una assignatura eminentment pràctica, no n'hi ha avaluació alternativa. El mateix sistema d'avaluació s'utilitzarà en totes les convocatòries. No hi ha nota mínima en cap dels apartats.

REFERÈNCIES

Bàsiques

- CRAMER, C. J. Essentials of Computational Chemistry. Theories and Models. 2ª Ed. Chichester, [etc.]: John Wiley & Sons, 2005. 596 p. ISBN 04-700-9181-9
- LEWARS, E. G. Computational Chemistry. Introduction to Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics. 2ª Ed. Dordrecht, [etc.]: Springer, 2011. 664 p. e-ISBN 978-90-481-3862-3
- JENSEN, F. Introduction to Computational Chemistry. Chichester, [etc.]: Wiley & Sons, 1999. 429 p. ISBN 04-719-8425-6

Complementàries

- BERTRÁN RUSCA, J. et al. Química cuántica: fundamentos y aplicaciones computacionales. Madrid: Síntesis, 2000. 287 p. ISBN 84-773-8742-7

- LEVINE, I. N. Química Cuántica. 5ª Ed. Requena Rodríguez, A; Bastida Pascual, A y Zúñiga Román, J. (Trad.). Madrid, [etc.]: Prentice Hall, 2001. 714 p. ISBN 84-205-3096-4
- SZABO, A. y OSTLUND, N. S. Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory. London, [etc.]: McGraw-Hill, 1996. 466 p. ISBN 04-866-9186-1