

**FICHA IDENTIFICATIVA****Datos de la Asignatura**

Código	34218
Nombre	Química Computacional
Ciclo	Grado
Créditos ECTS	4.5
Curso académico	2017 - 2018

Titulación(es)

Titulación	Centro	Curso	Periodo
1108 - Grado de Química	Facultad de Química	4	Primer cuatrimestre

Materias

Titulación	Materia	Caracter
1108 - Grado de Química	15 - Química Física Aplicada	Optativa

Coordinación

Nombre	Departamento
NEBOT GIL, IGNACIO JOSE	315 - Química Física

RESUMEN

DESCRIPTORES: Modelos teóricos y simulación computacional. Mecánica molecular. Dinámica molecular. Química cuántica. Cálculo de propiedades. Aplicaciones.

Juntamente con la Teoría y el Experimento, la Simulación (modelización) es el tercer pilar del conocimiento científico.

Desde la década de los 90, la evolución de la informática ha permitido la incorporación útil y efectiva de la modelización en el entorno Químico: La Química Computacional.

La Química Computacional es un área del conocimiento multidisciplinar. En ella convergen informática y documentación, la matemática (optimización, álgebra de operadores, cálculo, ecuaciones diferenciales, etc.) la física y química-física, la química cuántica, la bioquímica, las químicas orgánica, inorgánica y analítica e incluso la ingeniería. Se pretende, pues, dar una visión global de la Química desde la perspectiva de la modelización como eje vertebrador de todos los conocimientos adquiridos durante los estudios.



CONOCIMIENTOS PREVIOS

Relación con otras asignaturas de la misma titulación

No se han especificado restricciones de matrícula con otras asignaturas del plan de estudios.

Otros tipos de requisitos

PRERREQUISITOS: Enlace químico y Estructura de la Materia, Álgebra Lineal, Matemáticas, Cálculo Numérico, Fundamentos de Informática, Cálculo Diferencial, Quimiometría, Química Física II, Química Inorgánica, Bioquímica, Química Orgánica (Avanzada).

CONOCIMIENTOS PREVIOS: Los impartidos en las asignaturas prerequisite, especialmente los adquiridos como fundamentos de matemáticas, estadística, optimización, mecánica cuántica y espectroscopia.

COMPETENCIAS

1108 - Grado de Química

- Desarrollar capacidad de análisis, síntesis y razonamiento crítico.
- Demostrar capacidad inductiva y deductiva.
- Demostrar capacidad de gestión y dirección, espíritu emprendedor, iniciativa, creatividad, organización, planificación, control, liderazgo, toma de decisiones y negociación.
- Resolver problemas de forma efectiva.
- Demostrar capacidad de trabajo en equipo incluyendo equipos de carácter interdisciplinar y en un contexto internacional.
- Demostrar habilidad para transmitir información, ideas, problemas y soluciones tanto a un público especializado como no especializado y utilizando si procede las tecnologías de la información.
- Comprometerse con la ética, los valores de igualdad y la responsabilidad social como ciudadano y como profesional.
- Adquirir una sensibilidad permanente por la calidad y el medio ambiente, el desarrollo sostenible y la prevención de riesgos laborales.
- Demostrar que conoce los aspectos principales de terminología química, nomenclatura, convenios y unidades.
- Demostrar que conoce las características y comportamiento de los diferentes estados de la materia y las teorías empleadas para describirlos.
- Demostrar que conoce los tipos principales de reacción química y sus principales características asociadas.
- Demostrar que conoce los principios de la Mecánica Cuántica y su aplicación a la descripción de la estructura y propiedades de átomos y moléculas.



- Demostrar que conoce la metrología de los procesos químicos incluyendo la gestión de calidad.
- Relacionar las propiedades macroscópicas y propiedades de átomos y moléculas individuales, incluyendo macromoléculas (naturales y sintéticas), polímeros, coloides y otros materiales.
- Demostrar que conoce la estructura y reactividad de las principales clases de biomoléculas y la química de los principales procesos biológicos.
- Demostrar el conocimiento y comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionadas con las áreas de la Química.
- Resolver problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados.
- Evaluar, interpretar y sintetizar los datos e información Química.
- Manipular con seguridad los productos químicos.
- Manejar la instrumentación química utilizada en las distintas áreas de la Química.
- Interpretar los datos procedentes de observaciones y medidas en el laboratorio en términos de su significación y de las teorías que la sustentan.
- Valorar los riesgos en el uso de sustancias químicas y procedimientos de laboratorio.
- Relacionar teoría y experimentación.
- Reconocer y valorar los procesos químicos en la vida diaria.
- Comprender los aspectos cualitativos y cuantitativos de los problemas químicos.
- Desarrollar metodologías sostenibles y respetuosas con el medio ambiente.
- Relacionar la Química con otras disciplinas.
- Que los estudiantes tengan la capacidad de reunir e interpretar datos relevantes (normalmente dentro de su área de estudio) para emitir juicios que incluyan una reflexión sobre temas relevantes de índole social, científica o ética.
- Que los estudiantes puedan transmitir información, ideas, problemas y soluciones a un público tanto especializado como no especializado.
- Que los estudiantes hayan desarrollado aquellas habilidades de aprendizaje necesarias para emprender estudios posteriores con un alto grado de autonomía.

RESULTADOS DE APRENDIZAJE

- 1.- Demostrar capacidad para distinguir los dominios de aplicación de las diferentes teorías, métodos y modelos de la Química Computacional (C1, C20, CE3, CE5, CE11, CE12, CE14, CE22).
- 2.- Demostrar capacidad para seleccionar el método adecuado al tipo de problema químico y conocer los errores esperables (C6, C13, C14, CE12, CE13, CE14).
- 3.- Demostrar capacidad para reconocer los efectos químico-físicos que son tenidos en cuenta y son necesarios en los cálculos y simulaciones de compuestos y reacciones químicas (C1, CE3, CE12, CE13, CE24).



- 4.- Demostrar conocimiento actualizado del estado de las aplicaciones informáticas (“software”) de cálculo y simulación de mayor uso en Química Computacional y sus principales “problemas diana” (“target problems”) (C12, C13, C14, CE1, CE11).
- 5.- Demostrar capacidad de generar información computacional (datos de entrada (“input”), formatos usuales en las aplicaciones de Química Computacional...) a partir de datos químicos (fórmulas empíricas, moleculares o estructurales, simetría molecular...) (C5, C14, C18, CE1, CE10, CE13, CE14, CE20).
- 6.- Demostrar capacidad de realizar de simulaciones computacionales básicas de estructuras moleculares, propiedades moleculares y reacciones químicas en fase gas (C3, C14, CE3, CE4, CE11, CE13).
- 7.- Demostrar capacidad de realizar simulaciones computacionales básicas en sistemas infinitos, medios condensados o entornos biológicos (C3, C13, C14, C15, CE3, CE11, CE13).
- 8.- Demostrar capacidad de analizar y valorar los resultados de las simulaciones computacionales (C1, C2, C3, C6, C12, C13, C14, CE11, CE23, CE24).

DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS

1. Familiarización con el entorno de cálculo

2 sesiones de 1,5 horas cada una:

Química Computacional

El entorno de trabajo: Linux

Energía potencial molecular

Especificación geometría molecular: matriz-Z

El input de Gaussian

2. Hartree-Fock (I)

1 Sesión de seminario de 1,5 horas

Ecuaciones de Hartree-Fock (HF)

Hamiltoniano molecular

Funciones polieletrónicas y monoeléctricas.

Energía molecular: Integrales de core, de Coulomb y de intercambio

Reglas de Slater

Operadores de Coulomb y de Intercambio

Obtención de los spin-orbitales óptimos: Teorema de Brillouin

Operador de Fock: Ecuaciones de HF

Ecuaciones canónicas de HF



3. Hartree-Fock (II)

1 Sesión de seminario de 1,5 horas
Sentido físico de las soluciones de las ecuaciones de HF
Integrales de core, de Coulomb y de intercambio
Orbitales ocupados y virtuales
Energía de los orbitales y energía molecular
Teorema de Koopmans

4. Hartree-Fock (III)

1 Sesión de seminario de 1,5 horas
HF restringido para sistemas en capa cerrada: Ecuaciones de Roothaan
HF en capa cerrada: Spin-Orbitales restringidos
Introducción de una base: Ecuaciones de Roothaan
La densidad de carga
Expresión de la matriz de Fock
Ortogonalización de la base
Procedimiento SCF
Valores esperados y análisis de población

5. Hartree-Fock (IV)

1 Sesión de seminario de 1,5 horas
HF no restringido para sistemas en capa abierta: Ecuaciones de Pople-Nesbet
HF en capa abierta: Spin-Orbitales no restringidos
Introducción de una base: Ecuaciones de Pople-Nesbet
Matrices de densidad no restringidas
Expresión de las matrices de Fock
Solución de las ecuaciones SCF no restringidas
El problema de la disociación y su solución no restringida: la molécula H₂ como ejemplo

6. Teoría del funcional de la densidad

1 Sesión de seminario de 1,5 horas
Teoría del funcional de la densidad
Los principios básicos de la teoría del funcional de la densidad (DFT)
La aproximación de Kohn-Sham
Aplicaciones de la DFT
Fortalezas y debilidades de la DFT



7. Métodos post HF (I)

1 Sesión de seminario de 1,5 horas

La correlación electrónica

Correlación electrónica

Propiedades formales de los métodos:

Extensividad

Consistencia con el tamaño

N-dependencia

El papel de las configuraciones doble y simplemente excitadas en la función de onda

Teoría de perturbaciones Rayleigh-Schrodinger

Teoría de perturbaciones de muchos cuerpos (MBPT)

8. Métodos post HF (II)

1 Sesión de seminario de 1,5 horas

Métodos de cálculo de la correlación electrónica

Métodos Moller-Plesset MP2 y MP4

Grado de excitación y orden de perturbación

Interacción de configuraciones. El problema de la falta de consistencia con el tamaño

Teoría de Coupled Cluster

9. Interacciones intermoleculares

1 Sesión de seminario d'1,5 horas

Interacciones intermoleculares

Introducción a las interacciones intermoleculares

Interacciones atractivas

Interacciones repulsivas

Interacción total y modelos simplificados

10. Mecánica Molecular

1 Sesión de seminario de 1,5 horas

Mecánica Molecular

Justificación de la mecánica molecular (MM)

Términos energéticos

Parametrización de un campo de fuerza y ejemplos



11. Dinámica Molecular

1 Sesión de seminario de 1,5 horas

Dinámica Molecular

Justificación de los métodos de simulación

Definición del sistema: condiciones de contorno

Dinámica Molecular

12. Energía y estructura electrónica

1 sesión de 3 horas

Energías de ionización y afinidades electrónicas de átomos

Curvas de disociación: HCl y HH

Visualización de la densidad electrónica y orbitales moleculares: etano, eteno, etino

Conceptos: cálculo HF y funciones de base

13. Optimización de estructuras moleculares

2 sesiones de 3 horas cada una

Optimización de una función: métodos

Estructuras estacionarias. Clasificación

Optimización de estructuras HF. Efecto de la base

Métodos de Funcional de la Densidad

Optimización con métodos DFT

Curvas de Energía potencial

Estructuras estacionarias

14. Cálculos espectroscópicos

1 sesión de 3 horas

Espectroscopia rotacional, vibracional y electrónica.

Modos normales.

Termoquímica

Conceptos: transiciones entre niveles energéticos. Funciones de partición, propiedades termodinámicas

15. Reactividad química

1 sesión de 3 horas

Superficie de Energía Potencial (SEP)

Estado de Transición

Camino de mínima energía

Teoría del Estado de Transición

Cálculo de la SEP de la reacción química $F^- + CH_3Cl$

Cálculo de la constante de velocidad



Localización directa de estados de transición

16. Efectos del disolvente sobre procesos químicos

1 sesión de 3 horas

Modelos discreto y continuo

Efecto del disolvente sobre el equilibrio tautomérico

Efecto del disolvente sobre el equilibrio conformacional

Efecto del disolvente sobre la reactividad química

Conceptos: interacciones intermoleculares

17. Cálculos de Dinámica Molecular

1 sesión de 3 horas

Introducción a la descripción de grandes sistemas

Campos de fuerza. El caso del agua

Dinámica Molecular del agua líquida. Función de distribución radial y número de coordinación

DM de disoluciones acuosas. Coeficiente de difusión

DM de biomoléculas. Plegamiento de proteínas

Conceptos: espacio configuracional

18. Aplicaciones

2 sesiones de aula de informática de 3 horas cada una

Desarrollo de dos pequeños proyectos en los que los estudiantes aplican los conceptos y los métodos que se han explicado en los contenidos del curso en su conjunto.

VOLUMEN DE TRABAJO

ACTIVIDAD	Horas	% Presencial
Prácticas en aula informática	36,00	100
Tutorías regladas	9,00	100
Elaboración de trabajos individuales	10,00	0
Estudio y trabajo autónomo	30,00	0
Lecturas de material complementario	2,50	0
Preparación de actividades de evaluación	10,00	0
Preparación de clases de teoría	10,00	0
Preparación de clases prácticas y de problemas	5,00	0
TOTAL	112,50	



METODOLOGÍA DOCENTE

Todas las actividades presenciales se realizarán en aula de informática.

Sesiones prácticas: Comprenden 8 sesiones prácticas de 3 horas. Consisten en una primera parte, de duración de alrededor de 30 minutos, en la que el profesor explica de forma resumida los fundamentos y las técnicas necesarias para la ejecución de la práctica. En una segunda parte, de duración de alrededor de 2,5 horas, se lleva a término el desarrollo de la práctica usando los paquetes informáticos adecuados. Corresponden a las unidades temáticas UT1 y desde la UT12 a la UT16.

Está previsto que el trabajo práctico de cada sesión se tenga que finalizar de forma autónoma por parte del alumno utilizando alrededor de 16 horas de las 30 de trabajo autónomo. La conclusión de la práctica consiste en acabar los cálculos y en la redacción de un breve informe de los resultados que se tiene que entregar en el plazo máximo de una semana. La dedicación media por parte del alumno es de 2 horas de trabajo autónomo, por sesión.

Con el objetivo de que el alumno pueda disponer, para su trabajo autónomo, de exactamente el mismo conjunto de programas que se usa en el aula de ordenadores, las prácticas se realizarán utilizando un disco virtual que contiene el sistema operativo y todos los programas de cálculo necesarios en la asignatura y del que los alumnos dispondrán de una copia.

Sesiones de fundamentación: Consisten en 10 sesiones teórico-prácticas de 1 hora de duración en las que se expondrán los conceptos fundamentales de la Química Computacional y su aplicación a los métodos de cálculo. Corresponden a las unidades temáticas UT2 a UT11.

Seminarios: Consisten en 10 sesiones de 30 minutos, a continuación de cada sesión de fundamentación, en las que los estudiantes, individualmente o por parejas, expondrán aspectos complementarios del mismo tema, tales como desarrollos de ecuaciones o evaluaciones críticas de la aplicación de los métodos. La asignación de los temas a los estudiantes se hará en el primer día de curso. Corresponden a las unidades temáticas UT2 a UT11.

Trabajos prácticos personalizados: En las dos últimas sesiones prácticas en aula de informática, los estudiantes tendrán que desarrollar dos pequeños proyectos de cálculo utilizando el conjunto de los conceptos y métodos del curso. Está previsto que el trabajo práctico de cada sesión se tenga que acabar de forma autónoma por parte del alumno utilizando alrededor de 14 horas, el resto de las 30 de trabajo autónomo. La conclusión de los proyectos consiste en acabar los cálculos y en la redacción de un informe de los resultados que se tiene que entregar en el plazo máximo de una semana. La dedicación media por parte del alumno es de 7 horas de trabajo autónomo, por sesión. Corresponden a la unidad temática UT17.

EVALUACIÓN

Para la evaluación de la asignatura Química computacional se valorarán:

- Prueba consistente en la realización de un trabajo práctico y su exposición oral: 60%
- Evaluación de la participación en los seminarios, especialmente del material elaborado y de las exposiciones orales: 10%
- Evaluación de informes y memorias correspondientes a las sesiones prácticas: 20%
- Evaluación continua de cada alumno, basada en la asistencia regular a las clases y actividades



presenciales, participación y grado de implicación en el proceso de enseñanza-aprendizaje: 10%

Siendo una asignatura eminentemente práctica no existe evaluación alternativa. El mismo sistema de evaluación se utilizará en todas las convocatorias. No hay nota mínima en ninguno de los apartados.

REFERENCIAS

Básicas

- 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

Complementarias

- 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