# FITXA IDENTIFICATIVA

| Dades de l'Assignatura | |
|---|---|
| **Codi** | 36463 |
| **Nom** | Química Computacional |
| **Cicle** | Grau |
| **Crèdits ECTS** | 6.0 |
| **Curs acadèmic** | 2018 - 2019 |

**Titulació/titulacions**

| Titulació | Centre | Curs | Període |
|---|---|---|---|
| 1110 - Grau de Química V2-2018 | Facultat de Química | 4 | Primer quadrimestre |

**Matèries**

| Titulació | Matèria | Caràcter |
|---|---|---|
| 1110 - Grau de Química V2-2018 | 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 en l'entorn Químic: La Química Computacional.

La Química Computacional és un àrea del coneixement multidisciplinària. En ella convergeixen informàtica i documentació, la matemàtica (optimització, àlgebra d'operadors, càlcul, equacions diferencials, etc.) la física i 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 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

Química General I i II, Matemàtiques I i II, Aplicacions Informàtiques en Química, Química Física II i III, Química Inorgànica III, Bioquímica, Química Orgànica III.
Els impartits en les assignatures prerequisit, especialment els adquirits com fonaments de matemàtiques, estadística, optimització, mecànica quàntica i espectroscòpia.

# COMPETÈNCIES

## 1110 - Grau de Química V2-2018

- 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 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.
- Interpretar les dades procedents d'observacions i mesures en el laboratori en termes de la seua significació i de les teories que la sustenten.
- Relacionar teoria i experimentació.
- Reconèixer i valorar els processos químics en la vida diària.
- Comprendre els aspectes qualitatius i quantitatius dels problemes químics.
- Que els estudiants hagen desenvolupat aquelles habilitats d'aprenentatge necessàries per a emprendre estudis posteriors amb un alt grau d'autonomia.
- Expressar-se correctament, tant en forma oral com escrita, en qualsevol de les llengües oficials de la Comunitat Valenciana.

## 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.

2.- Demostrar capacitat per a seleccionar el mètode adequat al tipus de problema químic i conèixer els errors previstos.

3.- Demostrar capacitat per a reconèixer els efectes químic-físics que són tinguts en compte i són necessaris en els càlculs i simulacions de compostos i reaccions químiques.

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”).

5.- Demostrar capacitat de generar 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…).

6.- Demostrar capacitat de realitzar simulacions computacionals bàsiques d'estructures moleculars, propietats moleculars i reaccions químiques en fase gas.

7.- Demostrar capacitat de realitzar simulacions computacionals bàsiques en sistemes infinits, mitjans condensats o entorns biològics.

8.- Demostrar capacitat d'analitzar i valorar els resultats de les simulacions computacionals.

# DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

## 1. Familiarització amb lentorn de càlcul

4,5 hores dexplicació i treball pràctic

Química Computacional
- Lentorn de treball: Linux
- Energia potencial molecular
- Especificació de la geometria molecular: matriu-Z
- Linput de Gaussian
- Gaussview & ChemOffice

## 2. Seminari sobre Hartree-Fock (I)

1 Sessió de seminari de 1,5 hores

Equacions de Hartree-Fock (HF)
- Hamiltonià molecular
- Funciones polielectròniques i monoelectròniques.
- Energia molecular: Integrals de core, de Coulomb i dintercanvi
- Regles de Slater
- Operadors de Coulomb y dintercanvi
- Obtenció dels spin-orbitals òptims: Teorema de Brillouin
- Operador de Fock: Equacions de HF
- Equacions canòniques de HF

## 3. Seminari sobre Hartree-Fock (II)

1 Sessió de seminari de 1,5 hores

Sentit físic de les solucions de les equacions de HF
- Integrals de core, de Coulomb i dintercanvi
- Orbitals ocupats i virtuals
- Energia dels orbitals i energia molecular
- Teorema de Koopmans

## 4. Seminari sobre Hartree-Fock (III)

1 Sessió de seminari de 1,5 hores

HF restringit per  sistemes en capa tancada: Equacions de Roothaan
- HF  en capa tancada: Spin-Orbitals restringits
- Introducció duna 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. Seminari sobre Hartree-Fock (IV)

1 Sessió de seminari de 1,5 hores

HF no restringit per sistemes en capa oberta: Equacions de Pople-Nesbet
- HF en capa oberta: Spin-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 exemple

## 6. Seminari sobre optimització de geometries moleculars

1 Sessió de seminari de 1,5 hores

Optimització Molecular
- Estructures de mínima energia
- Optimitzant una funció: mètodes
- Estructures estacionàries

## 7. Seminari sobre la teoria del funcional de la densitat

1 Sessió de seminari de 1,5 hores

Teoria del funcional de la densitat
- Els principis bàsics de la teoria del funcional de la densitat (DFT)
- Laproximació de Kohn-Sham
- Aplicacions de la DFT
- Fortaleses i febleses de la DFT

## 8. Fonaments de Reactivitat

1 Sessió de seminari de 1,5 hores

Reactivitat química
- Superfície d'Energia Potencial
- Estructures estacionàries
- Camí de mínima energia
- Teoria de l'estat de Transició

## 9. Mètodes semièmpirics

1 Sessió de seminari de 1 hora

Mètodos semiempírics de la teoria dorbitals moleculars
Aproximació de les integrals Hartree-Fock
Classificació Hückel Extés, Solapament Diferencial Nul (ZDO) y Omissió del Solapament Diferencial Diatòmic (NDDO)
Teoria i ús de les parametritzacions Model Austin (AM1) y Models Paramètrics nombre 3 (PM3) i nombre 6 (PM6)

## 10. Mètodes post HF (I)

1 Sessió de seminari de 1,5 hores

La correlació electrònica
Correlació electrònica
Propietats formals dels mètodes:
- Extensivitat
- Consistència amb la grandària
- N-dependència

El paper de les configuracions doble i simplement excitades en la funció dona
Teoria de pertorbacions Rayleigh-Schrodinger
Teoria de pertorbacions de molts cossos (MBPT)

## 11. Mètodes post HF (II)

1 Sessió de seminari de 1,5 hores

Mètodes de càlcul de la correlació electrònica
Mètodes Moller-Plesset MP2 i MP4
Grau dexcitació i ordre de pertorbació
Interacció de configuracions. El problema de la manca de consistència amb la grandària
Teoria de Coupled Cluster

## 12. Mecànica Molecular i models de continu

1 Sessió de seminari de 1,5 hores

Mecànica Molecular
Justificació de la mecànica molecular (MM)
Termes energètics
Parametrització dun camp de força i exemples
Models de Continu: termes energètics i càlcul

## 13. Dinàmica Molecular

1 Sessió de seminari de 1,5 hores

Dinàmica Molecular
- Justificació dels mètodes de simulació
- Definició del sistema: condicions de contorn
- Dinàmica Molecular

## 14. Energia i estructura electrònica

Treball pràctic dAula dInformàtica de 4,5 hores

- Energies dionització i afinitats electròniques dàtoms
- Corbes de dissociació: HCl i HH
- Visualització de la densitat electrònica i orbitals moleculars

Conceptes: càlcul HF i funcions de base

## 15. Optimització destructures moleculars

Treball pràctic dAula dInformàtica de 6 hores

- Optimització duna funció: mètodes
- Estructures estacionàries. Classificació
- Optimització destructures HF. Efecte de la base
- Mètodes de Funcional de la Densitat
- Optimització amb mètodes DFT
- Corbes dEnergia potencial
- Estructures estacionàries

## 16. Reactivitat química

Treball pràctic dAula dInformàtica de 4,5 hores

- Superfície dEnergia Potencial (SEP)
- Estat de Transició
- Camí de mínima energia
- Teoria de lEstat de Transició
- Càlcul de la SEP de la reacció química F- + CH3Cl
- Càlcul de la constant de velocitat
- Localització directa destats de transició

## 17. Càlculs semiempírics

Treball pràctic dAula dInformàtica de 2 hores

Métodes semiempírics vs Hartree-Fock/post-Hartree-Fock
Comparació de geometries i estabilitat de molècules de mida creixent
Conceptes: criteris de precisió de mètodes de química quàntica

## 18. Càlculs espectroscòpics

Treball pràctic dAula dInformàtica de 3 hores

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

## 19. Efectes del dissolvent sobre processos químics

Treball pràctic dAula dInformàtica de 4,5 hores

Models discret i continu
Efecte del dissolvent sobre lequilibri tautomèric
Efecte del dissolvent sobre lequilibri conformacional
Efecte del dissolvent sobre la reactivitat química
Conceptes: interaccions intermoleculars

## 20. Càlculs de Dinàmica Molecular

Treball pràctic dAula dInformàtica de 4,5 hores

Introducció a la descripció de grans sistemes
Camps de força. El cas de laigua
Dinàmica Molecular de laigua líquida. Funció de distribució radial i número de coordinació
DM de dissolucions aquoses. Coeficient de difusió
DM de biomolècules. Plegament de proteïnes
Conceptes: espai configuracional

## 21. Aplicacions

2 Sessions dAula dInformàtica de 2 hores cada una

Desenvolupament de dos xicotets projectes on els estudiants apliquen els conceptes i els mètodes que shan explicat en els continguts del curs en el seu conjunt

## VOLUM DE TREBALL

| ACTIVITAT | Hores | % Presencial |
|---|---|---|
| Pràctiques en aula informàtica | 48,00 | 100 |
| Classes de teoria | 12,00 | 100 |
| Elaboració de treballs individuals | 20,00 | 0 |
| Estudi i treball autònom | 35,00 | 0 |
| Preparació d'activitats d'avaluació | 10,00 | 0 |
| Preparació de classes de teoria | 15,00 | 0 |
| Preparació de classes pràctiques i de problemes | 10,00 | 0 |
| **TOTAL** | **150,00** | |

## METODOLOGIA DOCENT

**Sessions pràctiques en aula d'informàtica:**Comprenen 7 sessions pràctiques de 3 hores. Consisteixen en una primera part 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 es duu a terme el desenvolupament de la pràctica usant els paquets informàtics adequats. Corresponen a les unitats temàtiques des de la UT14 a la UT20.

Està previst que el treball pràctic de cada sessió s'haja d'acabar de forma autònoma per part de l'alumne. La conclusió de la pràctica consisteix a acabar els càlculs i en la redacció d'un breu informe dels resultats que s'ha de lliurar en el termini màxim d'una setmana. La dedicació mitjana per part de l'alumne és de aproximadament 2 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'usa a l'aula d'ordinadors, les pràctiques es duran a terme utilitzant un disc virtual que conté el sistema operatiu i tots els programes de càlcul necessaris en l'assignatura i del qual els alumnes en disposaran d'una còpia.

**Seminaris:**Consisteixen en 13 sessions de 1 ó 1,5 hores, en forma de seminari, on s'exposaran els conceptes fonamentals de la Química Computacional, fent relleu dels aspectes més importants per a l'aplicació dels mètodes de càlcul. Corresponen a les unitats temàtiques UT1 a UT13.

**Treballs pràctics personalitzats:**En les dues darreres sessions pràctiques en aula d'informàtica, els estudiants hauran de desenvolupar un xicotet projecte de càlcul utilitzant el conjunt dels conceptes i mètodes del curs. Està previst que el treball pràctic de cada sessió s'haja d'acabar de forma autònoma per part de l'alumne emprant al voltant de 4 hores, la resta de treball autònom. La conclusió dels projectes consisteix a acabar els càlculs i en la redacció d'un informe dels resultats que s'ha de defendre oralment. Corresponen a la unitat temàtica UT21.

## AVALUACIÓ

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

- Examen final: prova consistent en la realització d'un projecte. Es presentarà un informe escrit i es defensarà oralment (60%)
- Avaluació de la participació en les exposicions orals (10%)
- Avaluació d'informes, memòries corresponents a les sessions pràctiques (20%)

Avaluació contínua de cada alumne, basada en l'assistència regular a les classes i activitats presencials, participació i grau d'implicació en el procés d'ensenyament-aprenentatge (10%)

## REFERÈNCIES

### Bàsiques

- CRAMER, C.J. Essentials of Computational Chemistry. Theories and Models. Wiley, 2004.
- LEWARS, E.G. Computational Chemistry. Introduction to Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics. 2ª Ed. Springer, 2011
- JENSEN, F. Introduction to Computational Chemistry. Wiley, 1999.

### Complementàries

- BERTRÁN RUSCA, J., BRACHANDELL GALLO, V., MORENO FERRER, M., SODUPE FERRER, M. Química Cuántica: fundamentos y aplicaciones computacionales. Síntesis. Madrid, 2000
- LEVINE, I.N. Química Cuántica. 5a ed. Prentice Hall, 2001.
- SZABO, A., OSTLUND, N.S. Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory. Dover, 1996