

**FITXA IDENTIFICATIVA****Dades de l'Assignatura**

Codi	36463
Nom	Química Computacional
Cicle	Grau
Crèdits ECTS	6.0
Curs acadèmic	2019 - 2020

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 prerrequisit, 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.
- 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 públic 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.
- 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 principis de la mecànica quàntica i l'aplicació a la descripció de l'estructura i de les propietats d'àtoms i molècules.
- 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 qualitius 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 qualitius i quantitatius dels problemes químics.



- Relacionar la química amb altres disciplines.
- Que els estudiants tinguen la capacitat d'arreglar 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.
- Expressar-se correctament, tant en forma oral com escrita, en qualsevol de les llengües oficials de la Comunitat Valenciana.
- Posseir habilitats bàsiques en tecnologies de la informació i comunicació i gestionar adequadament la informació obtinguda.

RESULTATS DE L'APRENTATGE

L'apartat anterior recull les competències contingudes en el document VERIFICA. En aquesta assignatura s'aborden part dels resultats d'aprenentatge de la matèria Química Computacional que permeten adquirir, tant coneixements específics de Química, com habilitats i competències cognitives i competències generals recomanades per l'EUROPEAN CHEMISTRY THEMATIC NETWORK (ECTN) per al *Chemistry Eurobachelor® Label*. A la següent taula es relacionen els resultats d'aprenentatge adquirits en l'assignatura de Química Computacional relacionats amb les competències del grau en Química.

CONEIXEMENTS ESPECÍFICS DE QUÍMICA	
El procés d'aprenentatge ha de permetre als titulats de grau demostrar:	
	Competències de l'assignatura Química Computacional que contemplen els resultats d'aprenentatge EUROBACHELOR®
Les característiques dels diferents estats de la matèria i les teories utilitzades per a descriure'ls.	Demostrar que coneix les característiques i el comportament dels diferents estats de la matèria i les teories usades per descriure'ls.(CE3).
Els principis de la mecànica quàntica i la seva aplicació a la descripció de l'estructura i propietats dels àtoms i molècules.	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.(CE5).

**COMPETÈNCIES I HABILITATS COGNITIVES****El procés d'aprenentatge ha de permetre als titulats de grau demostrar:**

	Competències de l'assignatura Química Computacional que contemplen els resultats d'aprenentatge EUROBACHELOR®
Capacitat per a demostrar coneixement i comprensió dels fets, conceptes, principis i teories fonamentals relacionades amb els temes esmentats anteriorment.	Demostrar el coneixement i la comprensió dels fets essencials, dels conceptes, dels principis i de les teories relacionades amb les àrees de la química.(CE13).
Capacitat per a aplicar aquest coneixement i comprensió a la solució de problemes comuns qualitatiu i quantitativ.	Resoldre problemes qualitatiu i quantitativ segons models desenvolupats prèviament.(CE14). Reconèixer i analitzar problemes nous i planejar estratègies per solucionar-los.(CE15). Comprendre els aspectes qualitatiu i quantitativ dels problemes químics.(CE24).
Competències per a presentar i argumentar temes científics de forma oral i escrita a una audiència especialitzada.	Relacionar la química amb altres disciplines.(CE26). Elaborar informes, peritacions i projectes industrials i ambientals en l'àmbit químic.(CE27). Demostrar habilitat per a transmetre informació, idees, problemes i solucions tant a un públic especialitzat com no especialitzat i utilitzant si escau les tecnologies de la informació.(CG6). Que els estudiants puguin transmetre informació, idees, problemes i solucions a un públic tant especialitzat com no especialitzat.(CB4).
Capacitat per al càlcul i el processament de dades, relacionats amb informació i dades de química.	Resoldre problemes qualitatiu i quantitativ segons models desenvolupats prèviament.(CE14). Reconèixer i analitzar problemes nous i planejar estratègies per solucionar-los.(CE15).



COMPETÈNCIES I HABILITATS RELACIONADES AMB LA PRÀCTICA DE LA QUÍMICA

El procés d'aprenentatge ha de permetre als titulats de grau demostrar:

	Competències de l'assignatura Química Computacional que contemplen els resultats d'aprenentatge EUROBACHELOR®
Capacitat per a interpretar dades derivades de les observacions i mesures de laboratori en termes de la seva rellevància, i relacionar-los amb la teoria adequada.	Interpretar les dades procedents d'observacions i mesures en el laboratori en termes de la seua significació i de les teories que la sustenten.(CE20). Relacionar teoria i experimentació.(CE22). Reconèixer i valorar els processos químics en la vida diària.(CE23). Comprendre els aspectes qualitius i quantitatius dels problemes químics.(CE24). Relacionar la química amb altres disciplines.(CE26).

COMPETÈNCIES GENERALS

El procés d'aprenentatge ha de permetre als titulats de grau demostrar:

	Competències de l'assignatura Química Computacional que contemplen els resultats d'aprenentatge EUROBACHELOR®
Capacitat per a aplicar coneixement pràctic per a la resolució de problemes relacionats amb informació qualitativa i quantitativa.	Resoldre problemes de forma efectiva.(CG4). Resoldre problemes qualitius i quantitatius segons models desenvolupats prèviament.(CE14). Relacionar teoria i experimentació.(CE22). Reconèixer i valorar els processos químics en la vida diària.(CE23).



	Comprendre els aspectes qualitatiu i quantitatiu dels problemes químics.(CE24).
Capacitats de càlcul i aritmètiques, incloent aspectes tals com error d'anàlisi, estimacions d'ordres de magnitud, i ús correcte de les unitats.	Desenvolupar capacitat d'anàlisi, síntesi i raonament crític. (CG1). Demostrar capacitat inductiva i deductiva.(CG2). Resoldre problemes de forma efectiva.CG4).
Competències de gestió de la informació, en relació a fonts primàries i secundàries, incloent recuperació d'informació a través de cerques on-line.	Demostrar habilitat per a transmetre informació, idees, problemes i solucions tant a un públic especialitzat com no especialitzat i utilitzant si escau les tecnologies de la informació.(CG6). Posseir habilitats bàsiques en tecnologies de la informació i comunicació i gestionar adequadament la informació obtinguda(CT2).
Capacitat d'analitzar materials i sintetitzar conceptes.	Desenvolupar capacitat d'anàlisi, síntesi i raonament crític. (CG1). Demostrar capacitat inductiva i deductiva.(CG2). Que els estudiants tinguen la capacitat d'arreglar 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.(CB3).
Capacitat d'adaptar-se a noves situacions i prendre decisions.	Demostrar capacitat per a adaptar-se a situacions noves.(CG9). Reconèixer i analitzar problemes nous i planejar estratègies per solucionar-los.(CE15). Que els estudiants tinguen la capacitat d'arreglar 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.(CB3).
Habilitats relacionades amb la tecnologia de la informació tals com processador de textos,	Demostrar habilitat per a transmetre informació, idees, problemes i solucions tant a un públic especialitzat com no



full de càlcul, registre i emmagatzematge de dades, ús d'internet relacionada amb les assignatures.	especialitzat i utilitzant si escau les tecnologies de la informació.(CG6). Posseir habilitats bàsiques en tecnologies de la informació i comunicació i gestionar adequadament la informació obtinguda(CT2).
Competències de comunicació oral i escrita, en un dels principals idiomes europeus, a més de l'idioma del país d'origen.	Demostrar capacitat de treball en equip incloent equips de caràcter interdisciplinari i en un context internacional.(CG5). Comprometre's amb l'ètica, els valors d'igualtat i la responsabilitat social com a ciutadà i com professional.(CG7). Expressar-se correctament, tant en forma oral com escrita, en qualsevol de les llengües oficials de la Comunitat Valenciana.(CT1). Que els estudiants puguin transmetre informació, idees, problemes i solucions a un públic tant especialitzat com no especialitzat.(CB4). Posseir habilitats bàsiques en tecnologies de la informació i comunicació i gestionar adequadament la informació obtinguda.(CT2).
Competències d'estudi necessàries per al desenvolupament professional. Aquestes inclouran l'habilitat de treballar de forma autònoma.	Demostrar capacitat de gestió i direcció, esperit emprenedor, iniciativa, creativitat, organització, planificació, control, lideratge, presa de decisions i negociació.(CG3). Demostrar capacitat de treball en equip incloent equips de caràcter interdisciplinari i en un context internacional.(CG5). Aprendre de forma autònoma.(CG8). Demostrar capacitat per a adaptar-se a situacions noves.(CG9). Que els estudiants hagen desenvolupat aquelles habilitats d'aprenentatge necessàries per a emprendre estudis posteriors amb un alt grau d'autonomia.(CB5).



Aquests resultats d'aprenentatge han de permetre que, en acabar l'assignatura de "Química Computacional", l'estudiant/a ha de ser capaç de:

- 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 l'entorn de càlcul

4,5 hores d'explicació i treball pràctic

Química Computacional

L'entorn de treball: Linux

Energia potencial molecular

Especificació de la geometria molecular: matriu-Z

L'input de Gaussian

Gaussview & ChemOffice

2. Seminari sobre Hartree-Fock (I)

1 Sessió de seminari de 1,5 hores

Equacions de Hartree-Fock (HF)

Hamiltoniana molecular

Funciones polieletròniques i monoeletròniques.



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 d'orbitals moleculars

Aproximació de les integrals Hartree-Fock
Classificació Hückel Extès, 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:

- o Extensivitat
- o Consistència amb la grandària
- o N-dependència

El paper de les configuracions doble i simplement excitades en la funció d'ona

Teoria de perturbacions Rayleigh-Schrodinger

Teoria de perturbacions 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 d'excitació i ordre de perturbació

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 d'un 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 d'Aula d'Informàtica de 4,5 hores

Energies d'ionització i afinitats electròniques d'àtoms

Corbes de dissociació: HCl i HH

Visualització de la densitat electrònica i orbitals moleculars

Conceptes: càlcul HF i funcions de base

15. Optimització de estructures moleculars

Treball pràctic d'Aula d'Informàtica de 6 hores

Optimització d'una funció: mètodes

Estructures estacionàries. Classificació

Optimització de estructures HF. Efecte de la base

Mètodes de Funcional de la Densitat

Optimització amb mètodes DFT

Corbes d'Energia potencial

Estructures estacionàries

16. Reactivitat química

Treball pràctic d'Aula d'Informàtica de 4,5 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 $F^- + CH_3Cl$

Càlcul de la constant de velocitat

Localització directa d'estats de transició

17. Càlculs semiempírics

Treball pràctic d'Aula d'Informàtica de 2 hores

Mètodes 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 d'Aula d'Informàtica 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 d'Aula d'Informàtica de 4,5 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

20. Càlculs de Dinàmica Molecular

Treball pràctic d'Aula d'Informàtica de 4,5 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

21. Aplicacions

2 Sessions d'Aula d'Informàtica de 2 hores cada una

Desenvolupament de dos xicotets projectes on 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	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 pugui disposar, per al seu treball autònom, d'exactament el mateix conjunt de programes que s'usa a l'aula d'ordinadors, les pràctiques es duen 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 defensar 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. 2^a 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

ADDENDA COVID-19

Aquesta addenda només s'activarà si la situació sanitària ho requereix i previ acord del Consell de Govern