

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

Código	36463
Nombre	Química Computacional
Ciclo	Grado
Créditos ECTS	6.0
Curso académico	2022 - 2023

Titulación(es)

Titulación	Centro	Curso	Periodo
1110 - Grado en Química	Facultad de Química	4	Primer cuatrimestre

Materias

Titulación	Materia	Caracter
1110 - Grado en Química	15 - Química Física Aplicada	Optativa

Coordinación

Nombre	Departamento
TUÑÓN GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO	315 - Química Física

RESUMEN

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

Junto 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

Química General I y II, Matemáticas I y II, Aplicaciones Informáticas en Química, Química Física II y III, Química Inorgánica III, Bioquímica, Química Orgánica III.

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

COMPETENCIAS (RD 1393/2007) // RESULTADOS DEL APRENDIZAJE (RD 822/2021)

1110 - Grado en Química

- Desarrollar capacidad de análisis, síntesis y razonamiento crítico.
- Demostrar capacidad inductiva y deductiva.
- 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.
- Demostrar que conoce las características y comportamiento de los diferentes estados de la materia y las teorías empleadas para describirlos.
- 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 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.
- Interpretar los datos procedentes de observaciones y medidas en el laboratorio en términos de su significación y de las teorías que la sustentan.
- Relacionar teoría y experimentación.
- Reconocer y valorar los procesos químicos en la vida diaria.
- Comprender los aspectos cualitativos y cuantitativos de los problemas químicos.



- 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.
- Expresarse correctamente, tanto en forma oral como escrita, en cualquiera de las lenguas oficiales de la Comunidad Valenciana.
- Poseer habilidades básicas en tecnologías de la información y comunicación y gestionar adecuadamente la información obtenida.

RESULTADOS DE APRENDIZAJE (RD 1393/2007) // SIN CONTENIDO (RD 822/2021)

El apartado anterior recoge las competencias contenidas en el documento VERIFICA. En esta asignatura se abordan parte de los resultados de aprendizaje de la materia Química Computacional que permiten adquirir, tanto conocimientos específicos de Química, como habilidades y competencias cognitivas y competencias generales recomendadas por la EUROPEAN CHEMISTRY THEMATIC NETWORK (ECTN) for the Chemistry Eurobachelor® Label. En la siguiente tabla se relacionan los resultados de aprendizaje adquiridos en la asignatura de Química Computacional relacionados con las competencias del grado en Química.

CONOCIMIENTOS ESPECÍFICOS DE QUÍMICA	
El proceso de aprendizaje debe permitir a los titulados de grado demostrar:	
	Competencias de la asignatura Química Computacional que contemplan los resultados de aprendizaje EUROBACHELOR®
Las características de los diferentes estados de la materia y las teorías utilizadas para describirlos.	Demostrar que conoce las características y comportamiento de los diferentes estados de la materia y las teorías empleadas para describirlos (CE3).
Los principios de la mecánica cuántica y su aplicación a la descripción de la estructura y propiedades de los átomos y moléculas.	Demostrar que conoce los principios de la Mecánica Cuántica y su aplicación a la descripción de la estructura y propiedades de átomos y moléculas (CE5).

**COMPETENCIAS Y HABILIDADES COGNITIVAS****El proceso de aprendizaje debe permitir a los titulados de grado demostrar:**

	Competencias de la asignatura Química Computacional que contemplan los resultados de aprendizaje EUROBACHELOR®
Capacidad para demostrar conocimiento y comprensión de los hechos, conceptos, principios y teorías fundamentales relacionadas con los temas mencionados anteriormente.	Demostrar el conocimiento y comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionadas con las áreas de la Química (CE13).
Capacidad para aplicar dicho conocimiento y comprensión a la solución de problemas comunes cualitativos y cuantitativos.	Resolver problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados (CE14).
	Reconocer y analizar nuevos problemas y planear estrategias para solucionarlos (CE15).
	Comprender los aspectos cualitativos y cuantitativos de los problemas químicos (CE24).
Competencias para presentar y argumentar temas científicos de forma oral y escrita a una audiencia especializada.	Relacionar la Química con otras disciplinas (CE26).
	Elaborar informes, peritaciones y proyectos industriales y ambientales en el ámbito químico (CE27).
	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 (CG6).
	Que los estudiantes puedan transmitir información, ideas, problemas y soluciones a un público tanto especializado como no especializado (CB4).



Capacidad para el cálculo y el procesamiento de datos, relacionados con información y datos de química.	Resolver problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados (CE14).
	Reconocer y analizar nuevos problemas y planear estrategias para solucionarlos (CE15).

COMPETENCIAS Y HABILIDADES RELACIONADAS CON LA PRÁCTICA DE LA QUÍMICA

El proceso de aprendizaje debe permitir a los titulados de grado demostrar:

	Competencias de la asignatura Química Computacional que contemplan los resultados de aprendizaje EUROBACHELOR®
Capacidad para interpretar datos derivados de las observaciones y medidas de laboratorio en términos de su relevancia, y relacionarlos con la teoría adecuada.	Interpretar los datos procedentes de observaciones y medidas en el laboratorio en términos de su significación y de las teorías que la sustentan (CE20). Relacionar teoría y experimentación (CE22). Reconocer y valorar los procesos químicos en la vida diaria (CE23). Comprender los aspectos cualitativos y cuantitativos de los problemas químicos (CE24). Relacionar la Química con otras disciplinas (CE26).

COMPETENCIAS GENERALES

El proceso de aprendizaje debe permitir a los titulados de grado demostrar:

	Competencias de la asignatura Química Computacional que contemplan los resultados de aprendizaje EUROBACHELOR®
Capacidad para aplicar conocimiento práctico	Resolver problemas de forma efectiva (CG4).



para la resolución de problemas relacionados con información cualitativa y cuantitativa.	Resolver problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados (CE14). Relacionar teoría y experimentación (CE22). Reconocer y valorar los procesos químicos en la vida diaria (CE23). Comprender los aspectos cualitativos y cuantitativos de los problemas químicos (CE24).
Capacidades de cálculo y aritméticas, incluyendo aspectos tales como error de análisis, estimaciones de órdenes de magnitud, y uso correcto de las unidades.	Desarrollar capacidad de análisis, síntesis y razonamiento crítico (CG1). Demostrar capacidad inductiva y deductiva (CG2). Resolver problemas de forma efectiva CG4).
Competencias de gestión de la información, en relación a fuentes primarias y secundarias, incluyendo recuperación de información a través de búsquedas <i>on-line</i> .	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 (CG6). Poseer habilidades básicas en tecnologías de la información y comunicación y gestionar adecuadamente la información obtenida (CT2).
Capacidad de analizar materiales y sintetizar conceptos.	Desarrollar capacidad de análisis, síntesis y razonamiento crítico (CG1). Demostrar capacidad inductiva y deductiva (CG2). 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 (CB3).
Capacidad de adaptarse a nuevas situaciones y tomar decisiones.	Demostrar capacidad para adaptarse a nuevas situaciones (CG9). Reconocer y analizar nuevos problemas y planear estrategias para solucionarlos (CE15). Que los estudiantes tengan la capacidad de reunir e



	<p>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 (CB3).</p>
<p>Habilidades relacionadas con la tecnología de la información tales como procesador de textos, hoja de cálculo, registro y almacenamiento de datos, uso de internet relacionado con las asignaturas.</p>	<p>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 (CG6).</p> <p>Poseer habilidades básicas en tecnologías de la información y comunicación y gestionar adecuadamente la información obtenida (CT2).</p>
<p>Competencias de comunicación oral y escrita, en uno de los principales idiomas europeos, además del idioma del país de origen.</p>	<p>Demostrar capacidad de trabajo en equipo incluyendo equipos de carácter interdisciplinar y en un contexto internacional (CG5).</p> <p>Comprometerse con la ética, los valores de igualdad y la responsabilidad social como ciudadano y como profesional (CG7).</p> <p>Expresarse correctamente, tanto en forma oral como escrita, en cualquiera de las lenguas oficiales de la Comunidad Valenciana (CT1).</p> <p>Que los estudiantes puedan transmitir información, ideas, problemas y soluciones a un público tanto especializado como no especializado (CB4).</p> <p>Poseer habilidades básicas en tecnologías de la información y comunicación y gestionar adecuadamente la información obtenida (CT2).</p>
<p>Competencias de estudio necesarias para el desarrollo profesional. Éstas incluirán la habilidad de trabajar de forma autónoma.</p>	<p>Demostrar capacidad de gestión y dirección, espíritu emprendedor, iniciativa, creatividad, organización, planificación, liderazgo, toma decisiones y negociación (CG3).</p> <p>Demostrar capacidad de trabajo en equipo incluyendo equipos de carácter interdisciplinar y en un contexto internacional (CG5).</p> <p>Aprender de forma autónoma (CG8).</p>



	<p>Demostrar capacidad para adaptarse a nuevas situaciones (CG9).</p> <p>Que los estudiantes hayan desarrollado aquellas habilidades de aprendizaje necesarias para emprender estudios posteriores con un alto grado de autonomía (CB5).</p>
--	--

Estos resultados han de permitir que el alumno, al acabar la asignatura Química Computacional, sea capaz de:

- 1.- Demostrar capacidad para distinguir los dominios de aplicación de las diferentes teorías, métodos y modelos de la Química Computacional.
- 2.- Demostrar capacidad para seleccionar el método adecuado al tipo de problema químico y conocer los errores esperables.
- 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.
- 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”).
- 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...).
- 6.- Demostrar capacidad de realizar de simulaciones computacionales básicas de estructuras moleculares, propiedades moleculares y reacciones químicas en fase gas.
- 7.- Demostrar capacidad de realizar simulaciones computacionales básicas en sistemas infinitos, medios condensados o entornos biológicos.
- 8.- Demostrar capacidad de analizar y valorar los resultados de las simulaciones computacionales.

DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS

1. Familiarización con el entorno de cálculo

4,5 horas de explicación y trabajo práctico

Química Computacional

El entorno de trabajo: Linux

Energía potencial molecular

Especificación geometría molecular: matriz-Z

El input de Gaussian



Gaussview & ChemOffice

2. Seminario sobre Hartree-Fock (I)

1 Sesión de seminario de 1,5 horas

Ecuaciones de Hartree-Fock (HF)

Hamiltoniano molecular

Funciones polielectrónicas 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. Seminario sobre 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. Seminario sobre 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. Seminario sobre 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. Seminario sobre optimización de geometrías moleculares

1 Sesión de seminario de 1,5 horas

Optimización Molecular

Estructuras de mínima energía

Optimizando una función: métodos

Estructuras estacionarias

7. Seminario sobre la 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

8. Fundamentos de Reactividad

1 Sesión de seminario de 1,5 horas

Reactividad química

Superficie de Energía Potencia

Estructuras estacionarias

Camino de mínima energía

Teoría del estado de Transición



9. Métodos semiempíricos

1 Sesión de seminario de 1 hora

Métodos semiempíricos de la teoría de orbitales moleculares

Aproximación de las integrales Hartree-Fock

Clasificación Hückel Extendido, Solapamiento Diferencial Nulo (ZDO) y Omisión del Solapamiento Diferencial Diatómico (NDDO)

Teoría y uso de las parametrizaciones Modelo Austin (AM1) y Modelos Paramétricos número 3 (PM3) y número 6 (PM6)

10. Métodos post HF (I)

1 Sesión de seminario de 1,5 horas

La correlación electrónica

Correlación electrónica

Propiedades formales de los métodos:

- o Extensividad
- o Consistencia con el tamaño
- o 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)

11. 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

12. Mecánica Molecular y modelos de continuo

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

Modelos de continuo: términos energéticos y cálculo



13. 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

14. Energía y estructura electrónica

Trabajo práctico de aula de informática de 4,5 horas

- Energías de ionización y afinidades electrónicas de átomos
- Curvas de disociación: HCl y HH
- Visualización de la densidad electrónica y orbitales moleculares
- Conceptos: cálculo HF y funciones de base

15. Optimización de estructuras moleculares

Trabajo práctico de aula de informática de 6 horas

- 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

16. Reactividad química

Trabajo práctico de aula de informática 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



17. Cálculos semiempíricos

Trabajo práctico de aula de informática de 2 horas

Métodos emiempíricos vs Hartree-Fock/post-Hartree-Fock

Comparación de geometrías y estabilidad de moléculas de tamaño creciente

Conceptos: criterios de precisión de métodos de química cuántica

18. Cálculos espectroscópicos

Trabajo práctico de aula de informática de 3 horas

Espectroscopia rotacional, vibracional y electrónica.

Modos normales.

Termoquímica

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

19. Efectos del disolvente sobre procesos químicos

Trabajo práctico de aula de informática de 4,5 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

20. Cálculos de Dinámica Molecular

Trabajo práctico de aula de informática de 4,5 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

21. Aplicaciones



2 sesiones de aula de informática de 2 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	48,00	100
Tutorías regladas	12,00	100
Elaboración de trabajos individuales	20,00	0
Estudio y trabajo autónomo	35,00	0
Preparación de actividades de evaluación	10,00	0
Preparación de clases de teoría	15,00	0
Preparación de clases prácticas y de problemas	10,00	0
TOTAL	150,00	

METODOLOGÍA DOCENTE

Sesiones prácticas en aula de informática: Comprenden 7 sesiones prácticas de entre 3 y 6 horas. Consisten en una primera parte 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 se lleva a término el desarrollo de la práctica usando los paquetes informáticos adecuados. Corresponden a las unidades temáticas desde la UT14 a la UT20.

Está previsto que el trabajo práctico de cada sesión se tenga que finalizar de forma autónoma por parte del alumno. 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 aproximadamente 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.

Seminarios: Consisten en 13 sesiones de 1 ó 1,5 horas, en forma de seminario, donde se expondrán los conceptos fundamentales de la Química Computacional, haciendo hincapié en los aspectos más importantes para la aplicación de los métodos de cálculo. Corresponden a las unidades temáticas UT1 a UT13.

Trabajos prácticos personalizados: En las dos últimas sesiones prácticas en aula de informática, los estudiantes tendrán que desarrollar un pequeño proyecto 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 4 horas, el resto de trabajo autónomo. La conclusión de los proyectos consiste en acabar los cálculos y en la redacción de un informe que se



defenderá oralmente. Corresponden a la unidad temática UT21.

EVALUACIÓN

Para la evaluación de la asignatura Química computacional se valorarán:

- Examen final: prueba consistente en la realización de un proyecto: Se presentará un informe escrito y se defenderá oralmente (60%)
- Evaluación de la participación en 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%)

REFERENCIAS

Básicas

- 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.

Complementarias

- 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