

Plan 472 GRADO EN QUIMICA

Asignatura 45975 SIMULACIONES COMPUTACIONALES EN QUÍMICA

Grupo 1

### Tipo de asignatura (básica, obligatoria u optativa)

Optativa

### Créditos ECTS

6

### Competencias que contribuye a desarrollar

G.1- Ser capaz de comunicarse con corrección tanto de forma oral como escrita.

G.2- Ser capaz de resolver problemas tanto de naturaleza cualitativa como cuantitativa y de tomar decisiones.

G.3- Ser capaz de encontrar y manejar información, tanto de fuentes primarias como secundarias.

G.4- Ser capaz de trabajar de forma eficaz y autónoma mediante la planificación y la organización de su trabajo y de su tiempo.

G.8- Poseer los hábitos, capacidad de aprendizaje y autonomía necesarios para proseguir su formación posterior.

G.9- Conocer y apreciar las responsabilidades éticas y profesionales

mso-bidi-font-family:="" mso-bidi-font-size:="" new="" style="line-height: 150%; font-family: " times="">EC.1- Conocer y manejar los aspectos principales de terminología química.

mso-bidi-font-family:="" mso-bidi-font-size:="" new="" style="line-height: 150%; font-family: " times="">EC.2- Conocer la Tabla Periódica , su utilidad y las tendencias periódicas en las propiedades de los elementos.

mso-bidi-font-family:="" mso-bidi-font-size:="" new="" style="line-height: 150%; font-family: " times="">EC.3- Conocer los modelos y principios fundamentales de enlace entre los átomos, los principales tipos de compuestos a que esto da lugar y las consecuencias en la estructura y propiedades de los mismos.

mso-bidi-font-family:="" mso-bidi-font-size:="" new="" style="line-height: 150%; font-family: " times="">EC.5- Conocer los principales tipos de compuestos orgánicos e inorgánicos

mso-bidi-font-family:="" mso-bidi-font-size:="" new="" style="line-height: 150%; font-family: " times="">

mso-bidi-font-family:="" mso-bidi-font-size:="" new="" style="line-height: 150%; font-family: " times="">EH.1- Ser capaz de demostrar el conocimiento y comprensión de conceptos, principios y teorías esenciales en relación con la química.

mso-bidi-font-family:="" mso-bidi-font-size:="" new="" style="line-height: 150%; font-family: " times="">EH.2- Ser capaz de aplicar los conocimientos adquiridos a la resolución de problemas cualitativos y cuantitativos.

mso-bidi-font-family:="" mso-bidi-font-size:="" new="" style="line-height: 150%; font-family: " times="">EH.4- Ser capaz de analizar, interpretar y evaluar información química y datos químicos.

### Objetivos/Resultados de aprendizaje

Conocer los principios de la Química Computacional y su aplicación al estudio de sistemas químicos.

Conocer el fundamento de los métodos computacionales para el estudio de la estructura molecular. Poder predecir los espectros moleculares, valorando el grado de fiabilidad de dichas predicciones.

Conocer las técnicas básicas de simulación (Dinámica Molecular; Monte Carlo) y sus aplicaciones en fases condensadas, macromoléculas y sistemas de interés biológico.

Conocer los métodos computacionales para el estudio de las reacciones químicas y sus aplicaciones en campos de interés en la Química

Reconocer la importancia científica de la Química Computacional y su impacto en la sociedad tecnológica actual.

## Contenidos

Introducción a la Química Computacional. MecánicaMoleculr. Análisis confrmacinl. Aspectos básicos en el estudio computacional de la estructura molecular. Predicción teórica de espectros moleculares. Simulaciones computacionales en Cinética Química: modelización de reacciones (Ver programa detallado en fichero adjunto)

## Principios Metodológicos/Métodos Docentes

Las clases presenciales se basarán en clases expositivas (lecciones magistrales o lectures) para la exposición y desarrollo de los fundamentos teóricos, y clases prácticas, más participativas, en las que se resolverán ejercicios y problemas. En todos los casos, se utilizarán aquellas T.I.C. que favorezcan la comprensión y participación de los alumnos. Las clases expositivas se reducirán todo lo posible, para poder disponer de más clases de índole práctica. Se pretende desarrollar las clases en torno a problemas prácticos que el alumno deberá abordar, para fomentar la adquisición de habilidades en el uso de las herramientas computacionales para estudiar problemas químicos de diversa índole.

En las tutorías programadas se tratarán de forma pormenorizada cuestiones o dudas relacionadas con la asignatura.

## Criterios y sistemas de evaluación

mso-ansi-language:="" mso-bidi-font-style:="" mso-bidi-language:="" mso-fareast-font-family:="" mso-fareast-language:="" new="" style="font-family: " times="">La evaluación de los alumnos se realizará mediante: a) Seguimiento continuo a través de controles periódicos o evaluación de problemas, trabajos u otras actividades; b) Examen final. En la calificación final tendrá mayor peso la nota obtenida en el examen final

## Recursos de aprendizaje y apoyo tutorial

Los alumnos dispondrán en la plataforma MOODLE de la UVa (<http://campusvirtual.uva.es/>) de toda la información básica requerida: Guía docente, contenidos-presentaciones, ejercicios de autoevaluación, colección de problemas para desarrollar en las clases prácticas, materiales adicionales (links de interés, ficheros. etc). Todas las clases se impartirán en Aula de informática, para poder aprovechar al máximo las horas de clase para realizar trabajos prácticos sobre los ejercicios propuestos. Las tutorías se realizarán en el despacho del profesor (C217).

## Calendario y horario

Consultar página web de la titulación:

<http://www.cie.uva.es/sites/files/files/horarios/GQ.pdf>

## Tabla de Dedicación del Estudiante a la Asignatura/Plan de Trabajo

Actividades Presenciales

ECTS (horas)

Actividades no Presenciales

ECTS (horas)

Clases teóricas

(15)

Preparación y estudio personal de los contenidos teóricos

(20)

Clases prácticas y seminarios

(40)

Preparación y resolución de ejercicios y problemas

(40)

Asistencia a tutorías

(5)

Estudio y preparación de exámenes

(30)

Realización de exámenes y controles periódicos

total presenciales

(60)

total no presenciales

(90)

total volumen de trabajo

6 (150)

---

---

Responsable de la docencia (recomendable que se incluya información de contacto y breve CV en el que aparezcan sus líneas de investigación y alguna publicación relevante)

Antonio Largo

e-mail: [alargo@qf.uva.es](mailto:alargo@qf.uva.es)

extensión: 3482

Líneas de investigación:

- Estructura molecular de clusters de carbono dopados
- Astroquímica
- Reacciones de interés en química atmosférica

Algunas publicaciones recientes representativas:

C. Barrientos, P. Redondo, L. Largo, V.M. Rayón, A. Largo, "Gas-phase synthesis of precursors of interstellar glycine: a computational study of the reactions of acetic acid with hydroxylamine and its ionized and protonated derivatives", *Astrophysical Journal*, 748, 99 (7 pag.) (2012)

M.F. Zalazar, V.M. Rayón, A. Largo, "Molecular structure of uranium carbides: isomers of  $UC_3$ ", *Journal of Chemical Physics*, 138, 114307 (8pp) (2013)

P. Redondo, H. Martinez, A. Cimas, C. Barrientos, A. Largo, "Computational study of peptide bond formation in the gas phase through ion-molecule reactions", *Physical Chemistry Chemical Physics*, 15, 13005-13012 (2013)

Capítulo de libro para la docencia del Master Europeo en "Theoretical Chemistry and Computational Modelling"; J.J. Novoa, A. Largo, C. Barrientos, E. Besalú, Título del capítulo: "Computational Techniques: Computer Programming and Numerical Calculus"

REF. LIBRO: *Theoretical and Computational Chemistry: Foundations, Methods and Techniques*, p. 279-384; (eds.: J. Andrés, J. Bertrán), 2007 (ISBN: 978-84-8021-615-9).

---

Idioma en que se imparte

Español

---