

Plan 558 MÁSTER QUÍMICA SINTÉTICA E INDUSTRIAL  
 Asignatura 52247 QUÍMICA TEÓRICA Y COMPUTACIONAL  
 Grupo 1

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

Optativa

### Créditos ECTS

3

### Competencias que contribuye a desarrollar

#### Competencias generales

- G1.- Conocimiento del método científico.
- G2.- Competencia para aplicar los conocimientos adquiridos.
- G3.- Capacidad crítica, de análisis y síntesis, y capacidad de interpretación.
- G4.- Competencias metodológicas.
- G5.- Capacidad para valorar la originalidad y creatividad.
- G6.- Capacidades de comunicación.
- G7.- Capacidad de trabajo en equipo.
- G8.- Capacidad para el uso de las nuevas tecnologías.
- G9.- Desarrollar el interés por la formación permanente.
- G10.- Capacidad de aprendizaje autónomo.

#### Competencias Específicas

- E1.- Adquisición de destrezas técnicas generales en el ámbito de una o varias disciplinas químicas.
- E3.- Capacidad para iniciarse en la investigación en Química.
- E4.- Capacidad y destrezas para la gestión de las fuentes de la investigación en Química.

### Objetivos/Resultados de aprendizaje

El objetivo de esta asignatura es que los alumnos sean capaces de realizar cálculos teóricos sencillos sobre los sistemas con los que están trabajando en su Trabajo Fin de Máster, mediante el programa GAUSSIAN. Se proporcionarán los recursos suficientes como para que los alumnos sean capaces de enfrentarse a la modelización teórica de sus sistemas.

### Contenidos

TEMA 1. QUÍMICA COMPUTACIONAL. Introducción. Métodos principales. Especificaciones de geometría en química computacional: matrices Z y matrices cartesianas.

TEMA 2. MECÁNICA MOLECULAR. Fundamentos. Campos de fuerza. Minimización de gradientes. Métodos principales y ámbitos de aplicación.

TEMA 3. DINÁMICA MOLECULAR. Mínimos locales y estructuras promedio. Trayectorias. Método de Monte Carlo. Muestreo y cálculo de propiedades.

TEMA 4. MÉTODOS CUÁNTICOS (I). ASPECTOS GENERALES. La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. Unidades atómicas. Principio variacional. Ecuaciones de Roothan-Hall. Determinantes de Slater. Funciones de onda monodeterminantes. Métodos de Hartree-Fock: HF y UHF. Correlación electrónica. Métodos perturbacionales. Interacción de configuraciones.

TEMA 5. MÉTODOS CUÁNTICOS (II). MÉTODOS SEMIEMPÍRICOS. Hamiltonianos de core y de valencia. Aproximación ZDO. Métodos MNDO y PM3: puntos fuertes y débiles.

TEMA 6. MÉTODOS CUÁNTICOS (III): MÉTODOS AB INITIO. Orbitales de Slater. Orbitales gaussianos. Bases de funciones. Funciones de core y de valencia. Pseudopotenciales efectivos de core. Métodos HF y MP2.

TEMA 7. MÉTODOS CUÁNTICOS (IV): MÉTODOS DFT. Teoría del funcional de la densidad. Teoremas de Hohenberg-Kohn. Orbitales de Kohn-Sham.

Aproximaciones locales y con corrección de gradiente. Métodos híbridos.

TEMA 8. CÁLCULO DE PROPIEDADES MOLECULARES. Cálculo del espectro infrarrojo de una molécula. Cálculo de espectros de resonancia

magnética nuclear. Cálculo de propiedades quirópticas. Práctica 1: Cálculo de los espectros IR de dos moléculas diastereoméricas. Comparación con los resultados experimentales.

TEMA 9. CÁLCULO Y PREDICCIÓN DE LA REACTIVIDAD. Mínimos locales y estados de transición. Efectos del disolvente. Análisis armónico:

condiciones de Mclver-Komornicky. Coordenadas de reacción. Energías de activación y reacción. Cinéticas de Curtin-Hammet. Selectividad.

Descriptores de reactividad. Ecuación de Fukui-Klopman-Salem. Práctica 2: cálculo de la estereoselectividad de una reacción. Comparación con los resultados experimentales.

## Principios Metodológicos/Métodos Docentes

Métodos Docentes presenciales

- Clases teóricas.
- Clases de problemas y seminarios.
- Tutorías.

Métodos Docentes no presenciales

- Estudio y resolución de casos reales.
- Realización de trabajos.

## Criterios y sistemas de evaluación

Evaluación continua.

Evaluación teórico-práctica. Prácticas obligatorias. Informe final.

La evaluación del alumnado se llevará a cabo teniendo en cuenta, entre otros, dos aspectos: a) actitud, participación, implicación durante el desarrollo de la disciplina, y b) calidad del informe final presentado y su defensa ante sus compañeros y profesores, valorándose el grado de adquisición de competencias específicas de la disciplina

## Recursos de aprendizaje y apoyo tutorial

- Aula de video conferencia.
- Aula de informática.
- Software específico de cristalografía.
- Plataforma Moodle (Campus Virtual UVa)

## Calendario y horario

EL QUE SE PROPONGA DENTRO DE LA ORDENACIÓN Y PLANIFICACIÓN DEL MÁSTER.

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

ACTIVIDADES PRESENCIALES

HORAS

ACTIVIDADES NO PRESENCIALES

HORAS

Clases teórico-prácticas (T/M)

12

Estudio y trabajo autónomo individual

15

Clases prácticas de aula (A)

3

Estudio y trabajo autónomo grupal

Laboratorios (L)

Trabajo e informe final

30

Prácticas externas, clínicas o de campo

Seminarios (S)

12

Tutorías grupales (TG)

2

Evaluación

1

Total presencial

30

Total no presencial

45

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)

CV breve de Jose Miguel Martín Álvarez

NIF: 08971414-B

E-mail: josemiguel.martin.alvarez@uva.es

Teléfono: 983184622

Universidad / Institución: Universidad de Valladolid

Departamento / Instituto: Departamento de Química Física y Química Inorgánica

Categoría / Cargo / Nivel contractual: Profesor Titular de Universidad

Titulación académica (Grado): Licenciado en Ciencias Químicas Año: 1989

Titulación académica (Doctorado): Ciencias Químicas Universidad: Valladolid Año: 1996

Méritos de docencia reconocidos: 5 Tramos de docencia

Méritos de investigación reconocidos: 4 Tramos de Investigación

Líneas de Investigación:

Bioconjugación, complejos luminiscentes, nanotubos.

Publicaciones:

Autor de 50 trabajos publicados de investigación original en revistas de alto índice de impacto. Algunos artículos seleccionados más recientes:

1) Bartolomé, C.; Villafañe, F.; Martín-Alvarez, J.M.; Martínez-Ilarduya, J.M.; Espinet, P., "[Pd(Fmes)<sub>2</sub>(tmeda)]: A case of intermittent C-H...F-C hydrogen-bond interaction in solution"

Revista: Chem. Eur. J. Volumen: 19 Páginas, inicial: 3702 final: 3709 Fecha: 2013

2) Alvarez, C.M.; García-Escudero, L.A.; García-Rodríguez, R.; Martín-Alvarez, J.M.; Miguel, D.; Rayón, V.M., "Enhanced association for C70 over C60 with a metal complex with corannulene derivate ligands"

Revista: Dalton Trans. Volumen: 43 Páginas, inicial: 15693 final: 15696 Fecha: 2014

3) Alvarez, C.M.; Aullón, G.; Barbero, H.; García-Escudero, L.A.; Martínez-Pérez, C.; Martín-Alvarez, J.M.; Miguel, D., "Assembling nonplanar polyaromatic units by click chemistry. Study of multicorannulene systems as hosts for fullerenes"

Revista: Org. Lett. Volumen: 17 Páginas, inicial: 2578 final: 2581 Fecha: 2015

4) Alvarez, C.M.; Alvarez-Miguel, L.; García-Rodríguez, R.; Martín-Alvarez, J.M.; Miguel, D., "3-(Pyridin-2-yl)imidazo[1,5-a]pyridine (Pyridilindolizine) as ligand in complexes of transition and main-group metals"

Revista: Eur. J. Inorg. Chem. Volumen: 29 Páginas, inicial: 4921 final: 4934 Fecha: 2015

5) Gómez-Iglesias, P.; Guyon, F.; Khatyr, A.; Ulrich, G.; Knorr, M.; Martín-Alvarez, J.M.; Miguel, D.; Villafañe, F., "Luminescent rhenium(I) tricarbonyl complexes with pyrazolylamido ligands: photophysical, electrochemical, and computational studies"

Revista: Dalton Trans. Volumen: 44 Páginas, inicial: 17516 final: 17528 Fecha: 2015

6) Gómez-Iglesias, P.; Martín-Alvarez, J.M.; Miguel, D.; Villafañe, F., "Amidino ligands obtained from the coupling of 1-methylcytosine and nitrile: a new method to incorporate biomolecules into luminescent Re(CO)<sub>3</sub> complexes"

Revista: Dalton Trans. Volumen: 44 Páginas, inicial: 17478 final: 17481 Fecha: 2015

7) Infante, R.; Martín-Alvarez, J.M.; Andrés, C.; Nieto, J., "Dimethylzinc-Mediated Addition of Phenylacetylene to  $\beta$ -Diketones Catalyzed by Chiral Perhydro-1,3-benzoxazines"

Revista: Organic Letters Volumen: 19 Páginas, inicial: 1516 final: 1519 Fecha: 2017

8) Pérez-Briso, C.; Gallego, A.M.; Martín-Alvarez, J.M.; Martínez-Ilarduya, J.M.; Espinet, P., "Polymer [Pd(CH<sub>2</sub>SO<sub>2</sub>C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>Me)<sub>2</sub>]<sub>n</sub>, a precursor to remarkably stable Pd organometallics"

---

## Idioma en que se imparte

Español

---