



## Proyecto/Guía docente de la asignatura

<b>Asignatura</b>	Química Teórica y Computacional		
<b>Materia</b>			
<b>Módulo</b>			
<b>Titulación</b>	Máster interuniversitario en Química Sintética e Industrial		
<b>Plan</b>		<b>Código</b>	
<b>Periodo de impartición</b>	2º cuatrimestre	<b>Tipo/Carácter</b>	Optativa
<b>Nivel/Ciclo</b>	Máster Universitario	<b>Curso</b>	
<b>Créditos ECTS</b>	3		
<b>Lengua en que se imparte</b>	Español		
<b>Profesor/es responsable/s</b>	Jose Miguel Martín Álvarez		
<b>Departamento(s)</b>	Química Física y Química Inorgánica		
<b>Datos de contacto (E-mail, teléfono...)</b>	<a href="mailto:josemiguel.martin.alvarez@uva.es">josemiguel.martin.alvarez@uva.es</a> (Teléfono: 983184622)		



## 1. Situación / Sentido de la Asignatura

---

### 1.1 Contextualización

---

La asignatura pretende iniciar a los alumnos en los cálculos teóricos, campo de investigación con claras conexiones con la Química, pero también con la Ciencia de Materiales, la Física, la Biología o la Geología.

La asignatura abordará, en una primera parte teórica, los conceptos básicos de Química Cuántica y de la modelización molecular. En una segunda parte, se enseñará la utilización del programa GAUSSIAN para la resolución de problemas sencillos, tanto de cálculo de propiedades moleculares como de reactividad.

Los cálculos teóricos son una herramienta cada vez más importante en investigación, que permite discutir los motivos de un determinado comportamiento químico y, en algunos casos, predecir cuál va a ser ese comportamiento.

### 1.2 Relación con otras materias

---

Los cálculos teóricos son una herramienta que cada vez se usa más como soporte en otras materias en general.

### 1.3 Prerrequisitos

---

No se requieren conocimientos previos de cálculos teóricos, aunque es recomendable repasar y recordar los conocimientos de Química Cuántica adquiridos durante el Grado de Química.



## 2. Competencias

### 2.1 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.

### 2.2 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.



### 3. Objetivos

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.





## 4. Contenidos y/o bloques temáticos

### c. Contenidos

#### **Tema 1. Química Computacional**

Introducción. Clasificación de los principales métodos computacionales. Especificaciones de geometría en química computacional: matrices Z, coordenadas internas, redundantes y cartesianas.

#### **Tema 2. Mecánica Molecular**

Campos de fuerza. Métodos principales y ámbitos de aplicación.

#### **Tema 3. Dinámica Molecular**

Análisis conformacional. Método de Monte Carlo. Dinámica molecular. 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. Métodos semiempíricos: 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.

#### **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 de espectros infrarrojos y de resonancia magnética nuclear. Cálculo de propiedades quirópticas.

#### **Tema 9. Cálculo y Predicción de la Reactividad**

Mínimos locales y estados de transición. Efectos del disolvente: modelos discretos y del continuo. Análisis armónico: condiciones de Mclver-Komornicky. Coordenadas de reacción. Energías de activación y reacción. Cinéticas de Curtin-Hammet. Selectividad. Descriptores de reactividad. DFT conceptual.



## f. Evaluación

---

Evaluación continua.

Práctica obligatoria, con informe final y presentación de los resultados en formato póster.

La evaluación del alumnado se llevará a cabo teniendo en cuenta, entre otros, dos aspectos:

- actitud, participación, implicación durante el desarrollo de la disciplina.
- calidad del informe final presentado, valorándose el grado de adquisición de competencias específicas de la disciplina.

## g. Bibliografía básica

---

- Cramer, C. J.: "Essentials of computational chemistry. Theories and models". Wiley: Chichester, 2002.
- Hehre, W. J.: "A guide to molecular mechanics and quantum chemical calculations", Wavefunction, Inc: Irvine, 2003.
- Leach, A. R.: "Molecular modelling —Principles and applications", Pearson: Harlow, UK, 2001.
- Bachrach, S. M.: "Computational Organic Chemistry", Wiley, 2014.
- Fleming, I.: "Molecular Orbitals and Organic Chemical Reactions", Wiley: Chichester, UK, 2010.
- Arrieta, A.; de la Torre, M. C.; de Cózar, A.; Sierra, M. A.; Cossío F. P.: "Computational chemistry: A useful tool for the chemical synthesis of complex molecules, heterocycles and catalysts" *Synlett* **2013**, 24, 0535-0549.
- Cossío, F. P.: "Calculation of kinetic data using computational methods". In "Rate constant calculation for thermal reactions —Methods and applications" (DaCosta, H., Fan, M., Eds.), Wiley: Hoboken, NJ, 2012.
- Sierra, M. A.; de la Torre, M. C.; Cossío, F. P.: "More dead ends and detours —En route to successful total synthesis", Wiley-VCH: Weinheim, GE, 2013.

## h. Bibliografía complementaria

---

- Pross, A.: "Theoretical & physical principles of organic reactivity". Wiley: New York, 1995.
- Parr, R. G.; Yang, W.: "Density-functional theory of atoms and molecules". Clarendon: Oxford, 1989.
- Bader, R. F. W.: "Atoms in molecules: A quantum approach". Clarendon: Oxford, 1990.
- Albright, T. A.; Burdett, J. K.; Whangbo, M. H.: "Orbital interactions in chemistry". Wiley: New York, 1985.



## 5. Métodos docentes y principios metodológicos

### Métodos Docentes presenciales

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

### Métodos Docentes no presenciales

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

### Recursos de aprendizaje y apoyo tutorial

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



## 6. Tabla de dedicación del estudiante a la asignatura

ACTIVIDADES PRESENCIALES	HORAS	ACTIVIDADES NO PRESENCIALES	HORAS
Clases teórico-prácticas (T/M)	12	Estudio y trabajo autónomo individual	15
Clases prácticas de aula (A)	12	Estudio y trabajo autónomo grupal	
Laboratorios (L)		Trabajo e informe final	30
Prácticas externas, clínicas o de campo			
Seminarios (S)	4		
Tutorías grupales (TG)	2		
Total presencial	<b>30</b>	<b>Total no presencial</b>	<b>45</b>

## 7. Sistema y características de la evaluación

INSTRUMENTO/PROCEDIMIENTO	PESO EN LA NOTA FINAL	OBSERVACIONES
Evaluación continua	50%	Se tendrá en cuenta la actitud, participación, implicación durante el desarrollo de la disciplina.
Evaluación de las prácticas obligatorias. Informe final	50%	Se tendrá en cuenta la calidad del informe final presentado, valorándose el grado de adquisición de competencias específicas de la disciplina.

### CRITERIOS DE CALIFICACIÓN

- **Convocatoria ordinaria:**
  - Los especificados en la tabla anterior.
- **Convocatoria extraordinaria:**
  - Los especificados en la tabla anterior.

## 8. Consideraciones finales