



Asignatura: Química Computacional  
Código: 16378  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Grado en Química  
Nivel: Grado  
Tipo: Formación Optativa  
Nº de créditos: 6 ECTS

## ASIGNATURA / COURSE TITLE

### 1.1. Código / Course number

16378

### 1.2. Materia / Content area

Química Computacional / Computational Chemistry

### 1.3. Tipo / Course type

Optativa / Optional

### 1.4. Nivel / Course level

Grado / Bachelor (first cycle)

### 1.5. Curso / Year

4º / 4<sup>th</sup>

### 1.6. Semestre / Semester

Primero / First

### 1.7. Idioma / Language

Español. Se emplea también Inglés en material docente / In addition to Spanish, English is also extensively used in teaching material

### 1.8. Requisitos previos / Prerequisites

No hay requisitos previos / There are no previous prerequisites

### 1.9. Requisitos mínimos de asistencia a las sesiones presenciales / Minimum attendance requirement

La asistencia a las sesiones prácticas en ordenador de la asignatura es obligatoria / Attendance to practical computing sessions is mandatory



Asignatura: Química Computacional  
Código: 16378  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Grado en Química  
Nivel: Grado  
Tipo: Formación Optativa  
Nº de créditos: 6 ECTS

## 1.10. Datos del equipo docente / Faculty data

### Coordinador:

Docente(s) / Lecturer(s): Alfredo Aguado Gómez  
Departamento de Química Física Aplicada/ Department of Applied Physical Chemistry  
Facultad de Ciencias / Faculty of Sciences  
Despacho - Módulo / Office - Module: Módulo 14-504  
Teléfono / Phone: +34 91 497 4954  
Correo electrónico/Email: alfredo.aguado@uam.es  
Página web/Website: <http://www.qfa.uam.es>  
Horario de atención al alumnado/Office hours:

## 1.11. Objetivos del curso / Course objectives

El principal objetivo de la Química Computacional es proporcionar los conocimientos teóricos necesarios para estudiar los sistemas de interés químico, utilizando para ello programas de cálculo.

En este aspecto, los objetivos que el estudiante debe alcanzar son:

Conocer los métodos teóricos para el estudio de la estructura molecular y su ámbito de aplicación.

Ser capaz de plantear el estudio de propiedades moleculares con dichos métodos.

Ser capaz de manejar programas de cálculo de la estructura y propiedades moleculares e interpretar los resultados.

Ser capaz de seleccionar los métodos y programas de cálculo apropiados para estudiar un determinado tipo de problema de interés químico, como es el cálculo de propiedades moleculares o el estudio de procesos reactivos.

## 1.12. Contenidos del programa / Course contents

4.5 ECTS Clases expositivas y tutorías, Al tener el curso un carácter eminentemente práctico el 75% del tiempo en cada tema se dedicará a prácticas en ordenador y el 25% a clase teórica. Las aplicaciones de los métodos se centrarán en el estudio de problemas de interés en Química en fase gas y en disolución.

1.5 ECTS Seminarios.



Asignatura: Química Computacional  
Código: 16378  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Grado en Química  
Nivel: Grado  
Tipo: Formación Optativa  
Nº de créditos: 6 ECTS

A continuación se detalla el programa, entre paréntesis se indica el porcentaje de tiempo dedicado a cada tema.

**Bloque 1-** Introducción a los métodos de cálculo de la estructura molecular (25%).

- Métodos "ab initio":
  - La aproximación de Hartree-Fock.
  - Correlación electrónica.
- Teoría del funcional de la densidad.
- Métodos aproximados.

**Bloque 2-** Estudios conformacionales (15%).

- Elección del método de cálculo.
- Elección del conjunto de funciones de base.
- Determinación de geometrías moleculares.
- Análisis y visualización de los Orbitales Moleculares.

**Bloque 3-** Análisis de la densidad electrónica (10%).

- Repartos de la densidad: cargas y multipolos atómicos.
- Análisis topológico: puntos críticos.
- Representación de la densidad y mapas de diferencia de densidad.

**Bloque 4-** Aplicaciones a la espectroscopia (15%).

- Espectroscopia electrónica.
- Modos normales de vibración: espectroscopia infrarroja.
- Rotación de moléculas: espectroscopia de microondas.
- Espectroscopia Raman.
- Espectroscopia de RMN

**Bloque 5-** Aplicaciones al estudio de las propiedades termodinámicas (15%).

- Funciones de partición.
- Entalpía, entropía y energía libre.
- Capacidad calorífica.



Asignatura: Química Computacional  
Código: 16378  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Grado en Química  
Nivel: Grado  
Tipo: Formación Optativa  
Nº de créditos: 6 ECTS

- Aplicación al cálculo de la entalpía, entropía y energía libre de una reacción.

#### **Bloque 6-** Aplicaciones a la reactividad química (10%).

- Superficies de Energía Potencial: búsqueda del estado de transición en una etapa elemental.
- Dinámica de reacciones.
- Índices de reactividad.
- Cálculo de constantes de velocidad.

#### **Bloque 7-** Modelización de macromoléculas y biomoléculas (10%).

- Métodos de mecánica molecular.
- Métodos híbridos: Modelos Clásicos/Cuánticos.

### 1.13. Referencias de consulta / **Course bibliography**

**Química Cuántica: fundamentos y aplicaciones computacionales.** J. Bertrán Rusca, V. Brachandell Gallo, M. Moreno Ferrer y M. Sodupe Ferrer. Síntesis. Madrid 2000.

**Química Cuántica.** Ira N. Levine (5ª edición). Prentice Hall, 2001

**Applied Quantum Chemistry.** G. Nagy-Szabo, R. Surjan and J.G. Angyan. Springer-Verlag, New York 2007.

**Exploring Chemistry with electronic structure.** J.B. Foresman y. A. Frisch. (2<sup>nd</sup> edition) Gaussian Inc. 1996

**Chemistry with Computation.** W.J. Hehre and W.W. Huang. Wavefunction 1995

**Introduction to computational chemistry.** F. Jensen. Wiley 1999

**Essentials of Computational Chemistry. Theories and Models.** C.J. Cramer. Wiley 2004



Asignatura: Química Computacional  
Código: 16378  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Grado en Química  
Nivel: Grado  
Tipo: Formación Optativa  
Nº de créditos: 6 ECTS

## 2. Métodos docentes / Teaching methodology

**Clases en aula de informática.** La docencia se impartirá en un aula de informática. Las clases, en sesiones de dos horas, incluirán una introducción teórica breve, en la que el profesor expondrá los conceptos básicos, y aplicaciones prácticas, y una parte práctica, en la que el estudiante aprenderá a través de la resolución de casos prácticos.

**Trabajos prácticos personalizados.** Durante las sesiones en el aula de informática el estudiante tendrá que realizar distintos trabajos, para los que se utilizarán programas de uso libre o para los que la universidad disponga de licencias que permitan al estudiante su utilización fuera de la UAM. La entrega de estos trabajos será obligatoria.

**Seminarios.** En ellos se discutirán los resultados obtenidos en los trabajos y las dudas sobre las metodologías empleadas.

**Tutorías.** El profesor realizará tutorías individuales o con grupos reducidos sobre cuestiones puntuales que los estudiantes puedan plantear.

**Docencia en red.** Se utilizará las distintas herramientas que ofrece la plataforma moodle (<http://www.uam.es/moodle>). Publicación de contenidos de la asignatura, herramientas de trabajo en grupo: foros de discusión y wiki, correo electrónico, etc.

## 3. Tiempo de trabajo del estudiante / Student workload

### Presencial:

Clases teórico/prácticas en aula de informática.....	40 horas
Seminarios.....	5 horas
Tutorías.....	10 horas

### No Presencial:

Preparación de seminarios, trabajos, y estudio.....	95 horas
---	----------

TOTAL (6 ECTS \* 25 horas/ECTS)..... 150 horas



Asignatura: Química Computacional  
Código: 16378  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Grado en Química  
Nivel: Grado  
Tipo: Formación Optativa  
Nº de créditos: 6 ECTS

#### 4. Métodos de evaluación y porcentaje en la calificación final / Evaluation procedures and weight of components in the final grade

##### Convocatoria ordinaria

El aprendizaje y la formación adquirida por el estudiante serán evaluados a lo largo de todo el curso, intentando que el estudiante avance de forma regular y constante en la asimilación de los contenidos de la asignatura.

La nota final de la asignatura se basará en los ejercicios, trabajos y discusión de los mismos que se irá realizando durante el curso. Dichos trabajos se puntuarán en base a los siguientes porcentajes:

- 60 % la memoria presentada por el estudiante,
- 40 % la discusión que sobre la misma se realice con el profesor en tutorías y seminarios.

##### Convocatoria extraordinaria

Se realizará un examen final único que será de carácter teórico y práctico, y que abarcará los contenidos de toda la asignatura. La parte práctica constará de un trabajo individual que tiene que realizar el estudiante con los programas utilizados a lo largo del curso. La puntuación en la convocatoria extraordinaria se realizará en base a los siguientes porcentajes:

- 70 % el examen final,
- 30 % el trabajo individual.

#### 5. Cronograma\* / Course calendar

Semana Week	Contenido Contents	Horas presenciales Contact hours	Horas no presenciales Independent study time
1-4	Introducción a los métodos	10 aula informática 2 seminarios 2 tutoría	25
5-12	Aplicaciones a problemas en Química	30 aula informática  3 seminario 8 tutoría	70

\*Este cronograma tiene carácter orientativo

