



Asignatura: Química Computacional/ [Computational Chemistry](#)  
Código: 32540  
Centro: Facultad de Ciencias / [Sciences Faculty](#)  
Titulación: Máster en Química Orgánica  
Nivel: Máster  
Tipo: Optativa

## **ASIGNATURA / COURSE TITLE**

Química Computacional / [Computational Chemistry](#)

### **1.1. Código / Course number**

32540

### **1.2. Materia / Content area**

Química Computacional / [Computational Chemistry](#)

### **1.3. Tipo / Course type**

Formación optativa / [Elective subject](#)

### **1.4. Nivel / Course level**

Máster / [Master \(second cycle\)](#)

### **1.5. Curso / Year**

Primero. Módulo 2 (M2)-Especialización / [First. 2nd Part-Specialization](#)

### **1.6. Semestre / Semester**

Primero / [First](#)

### **1.7. Idioma / Language**

Español o Inglés / [Spanish or English](#)

### **1.8. Requisitos previos / Prerequisites**

Haber superado las asignaturas del módulo M1, especialmente “Síntesis orgánica avanzada y mecanismos de reacción”, muy relacionada con este curso / [Students should have passed the first Part courses, specially “Advanced organic chemistry and reaction mechanisms”, closely related with this course](#)



Asignatura: Química Computacional/ **Computational Chemistry**

Código: 32540

Centro: Facultad de Ciencias / **Sciences Faculty**

Titulación: Máster en Química Orgánica

Nivel: Máster

Tipo: Optativa

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

La asistencia es obligatoria / **Attendance is mandatory**

### 1.10. **Datos del equipo docente / *Faculty data***

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Inés Alonso Montero  
Departamento de / **Department of**: Química Orgánica  
Facultad / **Faculty**: Ciencias  
Despacho - Módulo / **Office - Module**: Módulo 01 5ª planta  
Teléfono / **Phone**: +34 91 497 3876  
Correo electrónico/**Email**: [ines.alonso@uam.es](mailto:ines.alonso@uam.es)  
Página web/**Website**: <http://www.uam.es/catalisisasimetrica>  
Horario de atención al alumnado: L 16:00-17:00 h ó cita previa / **Office hours**: L 16:00-17:00 h. **It is also possible to arrange an appointment.**

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Diego J. Cárdenas Morales  
Departamento de / **Department of**: Química Orgánica  
Facultad / **Faculty**: Ciencias  
Despacho - Módulo / **Office - Module**: Módulo 01 Despacho 609  
Teléfono / **Phone**: +34 91 497 4358  
Correo electrónico/**Email**: [diego.cardenas@uam.es](mailto:diego.cardenas@uam.es)  
Página web/**Website**: <http://www.uam.es/organometalica>  
Horario de atención al alumnado: J 18:00-19:00 h ó cita previa / **Office hours**: J 18:00-19:00 h. **It is also possible to arrange an appointment.**

### 1.11. **Objetivos del curso / *Course objectives***

1. Conocer los fundamentos de los métodos computacionales que se emplean actualmente para el cálculo de la estructura y reactividad moleculares de especies orgánicas, bio-orgánicas y organometálicas / **Learning the fundamentals of the most common computational methods currently used for the calculation of molecular structure and reactivity of organic, bioorganic and organometallic species.**
2. Introducir al alumno en el manejo de las herramientas prácticas para llevar a cabo estos cálculos / **Learning how to use some of the most common computational tools to perform calculations.**



3. Conseguir que al final del curso el estudiante sea capaz de decidir y aplicar los métodos adecuados a cada problema, empleando alguno de los programas habituales / **To provide the student with the necessary knowledge in order she/he may decide the best computational approach to be used for solving a given problem.**

#### Competencias a desarrollar / **Abilities to be developed**

- Ser capaz de acceder y utilizar la información necesaria y manejar las herramientas informáticas adecuadas. Capacidad de aprendizaje y trabajo autónomo para el desarrollo de su vida profesional. Presentar públicamente los resultados de una investigación o un informe técnico / **Know how to get access and use the information required as well as using appropriate computer skills. Learning and independent working abilities for their career. To make a speech on the results of a research or technical report.**
- Conocer los métodos más habituales para el estudio teórico de las moléculas orgánicas y los mecanismos de reacción. Conocer y comprender dichos mecanismos así como los métodos disponibles para su determinación / **Learning the most common methods used for the theoretical study of organic molecules and reaction mechanisms. Understanding these mechanisms as well as the methods by which they are determined.**

#### **1.12. Contenidos del programa / *Course contents***

##### Contenidos teóricos / **Theoretical contents:**

1. Introducción. Métodos computacionales / **Introduction. Computational methods.**
2. Mecánica molecular. Dinámica molecular / **Molecular mechanics. Molecular dynamics.**
3. Métodos aproximados en mecánica cuántica: método variacional y método de perturbaciones. Aproximación de Born-Oppenheimer. Función de onda polielectrónica / **Approximate methods in quantum chemistry: variational calculation and perturbation methods. Born-Oppenheimer approximation. Polyelectronic wave function.**
4. Métodos semiempíricos / **Semi-empirical methods.**
5. Método Hartree-Fock / **Hartree-Fock method.**
6. Métodos avanzados (IC, MP, CC). Teoría del funcional de la densidad. Métodos de análisis de la densidad electrónica. Métodos mixtos / **Advanced methods (CI, CC, MP). Density functional theory. Electronic density analysis methods. Mixed methods.**



7. Reactividad química. Superficies de energía potencial / **Chemical reactivity. Potential energy surfaces.**
8. Tratamiento del disolvente / **Calculations in solvent.**

Contenidos prácticos / **Practical contents:**

1. Cálculos de mecánica y dinámica molecular en química biológica / **Molecular mechanics and molecular dynamics in biological chemistry.**
2. Optimización de geometrías a distintos niveles de cálculo / **Geometry optimization at different calculation levels.**
3. Estudios conformacionales / **Conformational studies.**
4. Estudios de isosuperficies / **Studies of isosurfaces.**
5. Cálculo y representación de orbitales moleculares / **Calculation and visualization of molecular orbitals.**
6. Determinación de estados de transición y cálculo de energías de activación y de reacción / **Determination of transition state geometries, and activation and reaction energies.**

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

**BIBLIOGRAFÍA DE CONSULTA BÁSICA.**

- A. R. Leach, *Molecular Modelling, Principles and applications* (2nd Edition) Pearson, **2001**.
- S. M. Bachrach, *Computational Organic Chemistry* (2nd Edition) Wiley, **2014**.
- C. J. Cramer, *Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models*, (2nd Edition) Wiley, **2004**.
- F. Jensen, *Introduction to Computational Chemistry*, (2nd Edition) Wiley, **2007**.
- J. B. Foresman, A. Frisch, *Exploring Chemistry with electronic Structure Methods*. (2nd Edition) Gaussian, Inc. Pittsburgh, PA. **1996**.

**BIBLIOGRAFÍA DE CONSULTA ESPECÍFICA.**

- B. M. Rode, T. S. Hofer, M. D. Kugler, *The basics of Theoretical and Computational Chemistry*, Wiley, **2007**.
- I. N. Levine, *Quantum Chemistry* (7th Edition), Pearson, **2013**.
- J. Bertran, V. Branchadell, M. Moreno, M. Sodupe, *Química Cuántica, Fundamentos y Aplicaciones Computacionales* (2ª Edición), Síntesis, **2002**.



Asignatura: Química Computacional/ **Computational Chemistry**

Código: 32540

Centro: Facultad de Ciencias / **Sciences Faculty**

Titulación: Máster en Química Orgánica

Nivel: Máster

Tipo: Optativa

## 2. **Métodos docentes / Teaching methodology**

El curso incluye clases expositivas teóricas, y clases prácticas de cálculo computacional. En estas últimas, los estudiantes trabajarán de forma individual siempre que sea posible / **This course consists of both lectures on the fundamentals of quantum chemistry, and practical lessons in a computational chemistry lab. In the practical sessions, students will work individually, whenever possible.**

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

El estudiante asistirá aproximadamente a unas 12 clases presenciales de dos horas de duración, en las que se incluyen clases teóricas, prácticas de computación y exposición de trabajos. Con carácter general, se consideran 2 horas de estudio y la consulta de los libros recomendados para la asimilación de los contenidos de cada clase teórica. Por otra parte, se estima una hora de trabajo adicional del alumno para completar los ejercicios propuestos para cada hora de seminario / **Students will attend about 12 two hour lessons that will include lectures on fundamentals and theory, practical calculations on different topics and seminars by the students on previously reported works. As a general rule, students should devote two more studying hours for every one hour lecture. In addition, it is estimated that two more hours will be necessary to complete the exercises corresponding to every practical session.**



		Nº de horas / hours	Porcentaje / Percentage
Presencial	Clases teóricas presenciales / <b>Lectures</b>	6 h	32%
	Clases prácticas de cálculo computacional tutorizadas / <b>Practical lessons in a computational chemistry lab</b>	14 h	
	Exposición de trabajos / <b>Seminars by the students on previously reported works</b>	4 h	
No presencial	Estudio autónomo de los contenidos del curso / <b>Individual study about theoretical contents</b>	15 h	68%
	Preparación de ejercicios sobre las clases prácticas / <b>Preparation of exercises on practical lessons</b>	16 h	
	Preparación del trabajo final / <b>Preparation of final seminars by the students</b>	20 h	
<b>Total: 25 horas x 3 ECTS / Total: 25 hours x 3 ECTS</b>		<b>75 h</b>	<b>100%</b>

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

##### Convocatoria ordinaria / **Final grade:**

- La evaluación de los ejercicios prácticos propuestos permitirá realizar una evaluación continua del alumno y constituirá un 60% de la nota final / **Evaluation of the practical exercises will constitute 60% of the overall mark.**
- La exposición sobre un trabajo de química computacional al final del curso supondrá el 40% restante / **A brief lecture on a previously published work on computational chemistry will account for the remaining 40%.**

##### Convocatoria extraordinaria / **June exam:**

- Se propondrá al alumno un ejercicio práctico (60% de la nota) y un breve examen de los contenidos teóricos (40% restante) / **If the student did not pass the course, she/he will have to solve a practical exercise (accounting for 60% of the final mark), and a brief test on the theoretical contents (40%).**



Asignatura: Química Computacional/ [Computational Chemistry](#)

Código: 32540

Centro: Facultad de Ciencias / [Sciences Faculty](#)

Titulación: Máster en Química Orgánica

Nivel: Máster

Tipo: Optativa

## 5. Cronograma\* / [Course calendar](#)

Semana <a href="#">Week</a>	Contenido <a href="#">Contents</a>	Horas presenciales <a href="#">Contact hours</a>	Horas no presenciales <a href="#">Independent study time</a>
1	Adquisición de conocimientos básicos de química computacional y empleo de las herramientas informáticas más sencillas / <a href="#">Basic knowledge on computational chemistry and use of the more common computational tools and software.</a>	10	15
2	Estudio de problemas químicos concretos mediante las herramientas informáticas más utilizadas en investigación en Q. Orgánica / <a href="#">Study of chemical problems through the use of computational software usually employed in organic chemistry research</a>	10	16
3	Exposición de trabajos / <a href="#">Seminars by the students on previously reported works</a>	4	20
	<b>Total</b>	<b>24</b>	<b>51</b>
		<b>75 h (3 ECTS)</b>	

\*Este cronograma tiene carácter orientativo / [Approximate calendar](#).