



Asignatura: Química Computacional  
Código: 16378  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Grado en Química  
Curso Académico: 2017-2018  
Tipo: Optativa  
Nº. de Créditos: 6 ECTS

## 1. ASIGNATURA / COURSE TITLE

### 1.1. Código / Course number

16378

### 1.2. Materia/ Content area

Química Computacional / Computational Chemistry

### 1.3. Tipo / Course type

Asignatura Optativa/ Elective Subject

### 1.4. Nivel / Course level

Grado / Grade

### 1.5. Curso / Year

4º / 4<sup>th</sup>

### 1.6. Semestre / Semester

2º / 2<sup>nd</sup>

### 1.7. Idioma / Language

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

### 1.8. Requisitos previos / Prerequisites

Se recomienda tener formación básica en Química Física / It is advisable basic training in Physical Chemistry

### 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  
Curso Académico: 2017-2018  
Tipo: Optativa  
Nº. de Créditos: 6 ECTS

## Datos del equipo docente / Faculty data

### Coordinador:

Docente(s) / Lecturer(s): Miguel Paniagua Caparrós (Coordinador)  
Departamento de Química Física Aplicada/ Department of Applied Physical Chemistry  
Facultad de Ciencias / Faculty of Sciences  
Despacho - Módulo / Office - Module: Módulo 14,-504-2  
Teléfono / Phone: +34 91 497 4449  
Correo electrónico/Email: miguel.paniagua@uam.es  
Página web/Website: <https://moodle.uam.es>  
Horario de atención al alumnado/Office hours: Previa petición de hora

Enlace al profesorado del Grado en Química de la web:

<http://www.uam.es/ss/Satellite/Ciencias/es/1242671472425/listadoCombo/Profesorado.htm>

## 1.10. Objetivos del curso / Course objectives

El principal objetivo de la Química Computacional es proporcionar los conocimientos necesarios para estudiar los sistemas de interés químico con métodos teóricos, utilizando para ello programas de cálculo de la estructura electrónica y propiedades moleculares.

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.

Estos resultados de aprendizaje se enmarcan y contribuyen a la adquisición de las siguientes competencias del título:



#### COMPETENCIAS BÁSICAS:

- CB1: Que los estudiantes hayan demostrado poseer y comprender conocimientos en un área de estudio que parte de la base de la educación secundaria general, y se suele encontrar a un nivel que, si bien se apoya en libros de texto avanzados, incluye también algunos aspectos que implican conocimientos procedentes de la vanguardia de su campo de estudio.
- CB2: Que los estudiantes sepan aplicar sus conocimientos a su trabajo o vocación de una forma profesional y posean las competencias que suelen demostrarse por medio de la elaboración y defensa de argumentos y la resolución de problemas dentro de su área de estudio.
- CB3: Que los estudiantes tengan la capacidad de reunir e interpretar datos relevantes (normalmente dentro de su área de estudio) para emitir juicios que incluyan una reflexión sobre temas relevantes de índole social, científica o ética.
- CB4: Que los estudiantes puedan transmitir información, ideas, problemas y soluciones a un público tanto especializado como no especializado.
- CB5: Que los estudiantes hayan desarrollado aquellas habilidades de aprendizaje necesarias para emprender estudios posteriores con un alto grado de autonomía.

#### COMPETENCIAS GENERALES:

- CG1: Aplicar los principios del método científico.
- CG2: Buscar información en las fuentes bibliográficas adecuadas.
- CG4: Aplicar los principios básicos de las distintas ramas de la Química a cualquier proceso de transformación química y a la resolución de problemas cualitativos y cuantitativos.

#### COMPETENCIAS TRANSVERSALES:

- CT1: Poseer capacidad para analizar información y sintetizar conceptos.
- CT2: Ser capaz de adaptarse a nuevas situaciones y tomar decisiones.
- CT3: Demostrar autonomía y capacidad para gestionar el tiempo y la información.
- CT4: Adquirir hábitos de trabajo en equipo.
- CT5: Ser capaz de comunicar (oralmente y por escrito) y defender en público su trabajo, mostrando un manejo correcto del castellano e inglés.

#### COMPETENCIAS ESPECÍFICAS:

- CE1: Utilizar correctamente la terminología química básica: nomenclatura, convenciones y unidades.
- CE2: Distinguir los principales tipos de reacciones químicas y las características asociadas a las mismas.
- CE5: Reconocer las características de los diferentes estados de la materia y las teorías utilizadas para describirlos.
- CE6: Utilizar los principios de la mecánica cuántica para la descripción de la estructura y propiedades de átomos y moléculas.
- CE7: Aplicar los principios de la termodinámica a sistemas químicos.
- CE8: Utilizar los fundamentos de la cinética química, incluyendo catálisis, y la interpretación mecanística de las reacciones químicas.
  
- CE14: Relacionar las propiedades macroscópicas y las propiedades de los átomos



individuales, incluyendo macromoléculas, polímeros, minerales y otros materiales relacionados.

- CE17: Utilizar adecuadamente herramientas informáticas para obtener información, procesar datos y calcular propiedades de la materia.
- CE23: Realizar cálculos numéricos, con el uso correcto de unidades y análisis de errores.

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

### **BLOQUES TEMÁTICOS**

El temario está organizado en dos partes. En una primera parte (temas 1-3), se estudian los fundamentos de los métodos computacionales, haciendo especial énfasis en la aplicación al estudio de la geometría molecular y de la densidad electrónica asociada. La segunda parte (temas 4-7) se dedica a las aplicaciones prácticas, que se centrarán en el estudio de problemas de interés en Química en fase gas y en disolución. En concreto, se realizarán aplicaciones a la espectroscopia, termodinámica o reactividad, para acabar analizando las aplicaciones a macromoléculas y biomoléculas.

#### **Bloques temáticos**

1. Introducción a los métodos de cálculo de la estructura molecular.
2. Estudios conformacionales.
3. Análisis de la densidad electrónica.
4. Aplicaciones a la espectroscopia.
5. Aplicaciones al estudio de las propiedades termodinámicas.
6. Aplicaciones a la reactividad química.
7. Modelización de macromoléculas y biomoléculas.

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.

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

#### **Contenidos Teóricos y Prácticos**

1. Introducción a los métodos de cálculo de la estructura molecular (25%).
  - 1.1. Mecánica Molecular.
  - 1.2. Métodos aproximados.
  - 1.3. Métodos "ab initio":
    - La aproximación de Hartree-Fock.



- Métodos de cálculo de la correlación electrónica.
- 1.4. Teoría del funcional de la densidad.
- 2. **Estructura molecular (15%).**
  - 2.1. Elección del conjunto de funciones de base.
  - 2.2. Elección del método de cálculo.
  - 2.3. Determinación de geometrías moleculares.
  - 2.4. Análisis y visualización de los Orbitales Moleculares.
- 3. **Análisis de la densidad electrónica (10%).**
  - 3.1. Repartos de la densidad: cargas y multipolos atómicos.
  - 3.2. Análisis topológico: puntos críticos.
  - 3.3. Representación de la densidad y mapas de diferencia de densidad.
- 4. **Aplicaciones a la espectroscopia (15%).**
  - 4.1. Espectroscopia electrónica.
  - 4.2. Modos normales de vibración: espectroscopia infrarroja.
  - 4.3. Rotación de moléculas: espectroscopia de microondas.
  - 4.4. Espectroscopia Raman.
  - 4.5. Espectroscopia de RMN.
- 5. **Aplicaciones al estudio de las propiedades termodinámicas (15%).**
  - 5.1. Funciones de partición.
  - 5.2. Entalpía, entropía y energía libre.
  - 5.3. Capacidad calorífica.
  - 5.4. Aplicación al cálculo de la entalpía, entropía y energía libre de una reacción.
- 6. **Aplicaciones a la reactividad química (10%).**
  - 6.1. Superficies de Energía Potencial: búsqueda del estado de transición en una etapa elemental.
  - 6.2. Dinámica de reacciones.
  - 6.3. Índices de reactividad.
  - 6.4. Cálculo de constantes de velocidad.
- 7. **Modelización de macromoléculas y biomoléculas (10%).**
  - 7.1. Métodos de Mecánica Molecular.
  - 7.2. Métodos híbridos: Modelos Clásicos/Cuánticos.



Asignatura: Química Computacional  
Código: 16378  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Grado en Química  
Curso Académico: 2017-2018  
Tipo: Optativa  
Nº. de Créditos: 6 ECTS

## 1.12. 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

## 2. Métodos Docentes / Teaching methodology

### 1. 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. El objetivo será contribuir a que los alumnos adquieran las competencias CB1, CB2, CB3, CB5, CG1, CG2, CG4, CE1, CE2, CE5, CE6, CE7, CE8, CE14, CE17 y CE23.

### 2. 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. El objetivo será contribuir a que los alumnos adquieran las competencias CB4, CG1, CG2, CG4, CT1, CT2, CT3, CT4, CT5, CE1, CE2, CE5, CE6, CE7, CE8, CE14, CE17 y CE23.



Asignatura: Química Computacional  
Código: 16378  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Grado en Química  
Curso Académico: 2017-2018  
Tipo: Optativa  
Nº. de Créditos: 6 ECTS

### 3. Clases prácticas en aula.

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

### 4. Tutorías.

El profesor realizará tutorías individuales o con grupos reducidos sobre cuestiones puntuales que los estudiantes puedan plantear. Se fomentará la adquisición de las competencias CB2 y CG1, entre otras.

### 5. Docencia en red.

Se utilizará las distintas herramientas que ofrece la plataforma moodle (<https://moodle.uam.es>). Publicación de contenidos de la asignatura, herramientas de trabajo en grupo: foros de discusión y wiki, correo electrónico, etc. Se fomentará la adquisición de las competencias CB2 y CG1.

### 6. Pruebas de evaluación.

La evaluación de la asignatura se realiza de forma continua, lo que permite ir identificando a lo largo del curso las posibles carencias tanto individuales como del grupo. Esto permite proponer trabajos tanto individuales como de grupo, con el fin de subsanar estas carencias. Solamente en la convocatoria extraordinaria se realizará un examen teórico-práctico de evaluación de los conocimientos adquiridos.

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

		Nº de horas/(porcentaje)
Presencial	Clases teórico-prácticas en aula de informática/seminarios	40 h (26.7 %)
	Tutorías programadas a lo largo del semestre	10 h (6.7 %)
	Realización de pruebas de evaluación Exposición de trabajos	5 h (3,3 %)
	<b>Total presencial</b>	<b>55 h (36.7 %)</b>
No presencial	Estudio semanal (2 h x 15 semanas)	30 h (20 %)
	Realización de trabajos individuales y en grupo (4 h x 15 semanas)	60 h (40 %)
	Preparación de la prueba de evaluación/trabajo	5 h (3.3 %)
	<b>Total no presencial</b>	<b>95 h (63.3 %)</b>
<b>TOTAL</b>		<b>150 h</b>



#### 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 los profesores en tutorías, seminarios y exposición de trabajos.

*El estudiante que haya participado en menos de un 20% de las actividades de evaluación, será calificado en la convocatoria ordinaria como “No evaluado”.*

##### 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.

En el cuadro se resume el sistema de evaluación:

Sistema de Evaluación	Ponderación Convocatoria Ordinaria	Ponderación Convocatoria Extraordinaria
Entregas de trabajos	60%	30%
Discusión de los trabajos	40%	0%
Examen final	0%	70%





Asignatura: Química Computacional  
Código: 16378  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Grado en Química  
Curso Académico: 2017-2018  
Tipo: Optativa  
Nº. de Créditos: 6 ECTS

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

### CRONOGRAMA DE ACTIVIDADES

BLOQUE TEMÁTICO	ESTIMACIÓN SEMANAS / BLOQUE
1	3
2	2-3
3	2
4	2
5	2
6	2
7	1-2
<b>TOTAL</b>	<b>15 SEMANAS</b>