



UNIVERSIDAD DE BURGOS

DPTO. DE MATEMÁTICAS Y COMPUTACIÓN, DPTO. DE FÍSICA Y DPTO. DE QUÍMICA

GUÍA DOCENTE 2014-2015  
**Química Computacional.**

**1. Denominación de la asignatura:**

Química Computacional.

**Titulación**

Máster en Química Avanzada

**Código**

7470

**2. Materia o módulo a la que pertenece la asignatura:**

Formación General

**3. Departamento(s) responsable(s) de la asignatura:**

Dpto. de Matemáticas y Computación, Dpto. de Física y Dpto. de Química

**4.a Profesor que imparte la docencia (Si fuese impartida por mas de uno/a incluir todos/as) :**

M. Begoña Torres Cabrera, Nicolás A. Cordero Tejedor, José Vicente Cuevas Vicario

**4.b Coordinador de la asignatura**

M. Begoña Torres Cabrera

**5. Curso y semestre en el que se imparte la asignatura:**

Primer semestre



**6. Tipo de la asignatura: (Básica, obligatoria u optativa)**

Básica

**7. Requisitos de formación previos para cursar la asignatura:**

-Conocimiento a nivel de usuario de cualquier sistema operativo de uso corriente en ordenadores. -Conocimiento de configuraciones electrónicas de átomos y moléculas sencillos.

**8. Número de créditos ECTS de la asignatura:**

5

**9. Competencias que debe adquirir el alumno/a al cursar la asignatura**

COMPETENCIAS BÁSICAS Y GENÉRICAS.

CB6 - Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación.

CB7 - Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio

CB8 - Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios

CB9 - Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades

CB10 - Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.

CG2 - Tener conocimientos de informática relativos al ámbito de estudio incluyendo las habilidades básicas en Tecnologías de la Información y Comunicación

CG5 - Tener habilidades en las relaciones interpersonales, demostrando iniciativa, liderazgo y motivación por la calidad, de modo que



pueda desarrollar trabajos en equipo

CG6 - Poseer la capacidad de gestionar, evaluar, interpretar, sintetizar y transmitir adecuadamente la información química

#### COMPETENCIAS ESPECÍFICAS

CE1- Haber adquirido conocimientos avanzados de Química demostrando, en un contexto altamente especializado, una comprensión detallada y fundamentada de los aspectos teóricos y prácticos y de la metodología de trabajo en Química.

CE7.- Poseer habilidades en el manejo de herramientas informáticas avanzadas que se utilizan en el ámbito de la Química.

### 10. Programa de la asignatura

| 10.1- Objetivos docentes                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <ul style="list-style-type: none"><li>- Demostrar comprensión de las principales ideas y conceptos químicos en los que se basan los diferentes modelos computacionales utilizados.</li><li>- Tener habilidad en la utilización de paquetes de software especializados como Gaussian03, muy extendido en la comunidad científica debido a la obtención de excelentes resultados comparables con los experimentos.</li><li>- Ser capaz de realizar pequeñas simulaciones computacionales en sistemas de gran interés en la actualidad en Química.</li></ul> |
| 10.2- Unidades docentes (Bloques de contenidos)                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           |
| <p style="text-align: center;"><b>Unidad 1.</b></p> <p><b>Introducción.</b></p> <p>Visión general de las técnicas de simulación.</p> <p style="text-align: center;"><b>Unidad 2.</b></p> <p><b>Mecánica molecular.</b></p> <p>Campos de fuerza y su parametrización.</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                  |



### **Unidad 3.**

#### **Hartree-Fock.**

Átomo de helio. Determinantes de Slater. Intercambio. Simetría traslacional. Interacción de configuraciones (CI, MP).

### **Unidad 4.**

#### **Sistemas periódicos y ondas planas.**

Método de ondas planas (PW). Bases aumentadas (APW). Bases linealizadas (LAPW).

### **Unidad 5.**

#### **Sistemas periódicos y bases localizadas.**

Bases de Slater. Bases gaussianas. Bases contraídas.

### **Unidad 6.**

#### **Teoría del Funcional de la Densidad (DFT).**

Modelo de Thomas y Fermi (TF). Ecuaciones de Kohn y Sham (KS). Funcionales de intercambio y correlación.

### **Unidad 7.**

#### **Pseudopotenciales.**

Ashcroft. Hamman. Troullier y Martins (TM). Perdew y Fiolhais (PF).

### **Unidad 8.**

#### **Métodos semiempíricos.**

Extended Hückel, CNDO, INDO.



### **Unidad 9.**

#### **Dinámica Molecular.**

Ecuaciones clásicas y cuánticas. Métodos de integración.

### **Unidad 10.**

#### **Monte Carlo.**

Integración. Cadenas de Markov.

#### **10.3- Bibliografía**

##### **BIBLIOGRAFÍA BÁSICA**

F. Jensen , (2001) Introduction to Computational Chemistry, John Wiley & Sons.,  
J.M. Thijssen , (1999) Computational physics,, Cambridge University Press.,  
James B. Foresman and Æleen Frisch , (1996) Exploring Chemistry with Electronic Structure Methohds, 2ª, Gaussian, Inc.,  
M.P. Allen y D.J. Tildesley , (1987) Computer simulation of liquids,, Oxford University Press: New York.,

##### **BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA**

A. Hinchliffe , (2003) Molecular Modelling for Beginners,, John Wiley & Sons.,  
A. Szabo y N.S. Ostlund , (1989) Modern quantum chemistry: introduction to advanced electronic structure theory, Dover Publications.,  
Bases, , <https://bse.pnl.gov/bse/portal>, ,  
C. J. Cramer , (2002) Essentials of Computational Chemistry, John Wiley & Sons.,  
Gaussian, , <http://www.gaussian.com/>, ,  
M. Springborg (Editor) , (1997) Density functional methods in chemistry and materials science, John Wiley & Sons.,  
P. Comba, T. W. Hambley , (2001) Molecular Modeling of Inorganic Compounds,, Wiley-VCH.,  
R. Parr y W. Yang,, (1989) Density-functional theory of atoms and molecules,, Oxford University Press.,  
R.M. Dreizler y E.K.U. Gross,, (1990) Density functional theory: an approach to the quantum many-body problem,, Springer Verlag.,

**11. Metodología de enseñanza y aprendizaje y su relación con las competencias que debe adquirir el estudiante:**

| Metodología                                                                                        | Competencia relacionada                  | Horas presenciales | Horas de trabajo | Total de horas |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------|--------------------|------------------|----------------|
| Clases de teoría                                                                                   | CB6,CB8,CB9,CB10,CG2,CG5,CG6,CE1,CE7     | 15                 | 15               | 30             |
| Clases prácticas en ordenador utilizando Gaussian03.                                               | CB6,CB7,CB8,CB9,CB10,CG2,CG5,CG6,CE1,CE7 | 25                 | 35               | 60             |
| Simulaciones con Gaussian03 de sistemas de gran interés en Química y/o preferentes para el alumno. | CB6,CB7,CB8,CB9,CB10,CE1,CE7             | 0                  | 15               | 15             |
| Seminarios y tutorías                                                                              | CB6,CB7,CB8,CB9,CB10,CE1,CE7             | 5                  | 15               | 20             |
| <b>Total</b>                                                                                       |                                          | 45                 | 80               | 125            |

**12. Sistemas de evaluación:**

Para superar la asignatura será necesario alcanzar en cada uno de los bloques de procedimientos de evaluación una calificación mínima de 4 sobre 10 y una calificación total de la asignatura de un 5 sobre 10.

Actividades NO recuperables en segunda convocatoria (debido a la propia naturaleza de esta actividad):

A) La realización de las prácticas será una actividad NO recuperable.  
la actividad por su propia naturaleza no será recuperables

| Procedimiento                                                                           | Peso primera convocatoria | Peso segunda convocatoria |
|-----------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------|---------------------------|
| A) Realización de las prácticas. Calificación mínima: 4 sobre 10.                       | 30 %                      | 30 %                      |
| B) Resolución de ejercicios propuestos periódicamente. Calificación mínima: 4 sobre 10. | 40 %                      | 0 %                       |
| B) Resolución de ejercicios propuestos. Calificación                                    | 0 %                       | 40 %                      |



|                                                                                                             |              |              |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------|--------------|
| mínima: 4 sobre 10.                                                                                         |              |              |
| C) Simulaciones en un sistema químico que puede ser elegido por el alumno. Calificación mínima: 4 sobre 10. | 30 %         | 30 %         |
| <b>Total</b>                                                                                                | <b>100 %</b> | <b>100 %</b> |

**Evaluación excepcional:**

REQUISITO: Será requisito la asistencia, como mínimo, al 80% de las clases prácticas.

La evaluación excepcional consistirá en la realización de las siguientes pruebas:

- Prueba oral donde deberá demostrarse que se han adquirido las habilidades, destrezas, conocimientos y aptitudes que se incluyen en la Guía Docente de la asignatura (20%)
- Informes escritos de las sesiones prácticas. (10%)
- Prueba escrita sobre conocimientos de la asignatura. (40%)
- Simulación computacional (30%)

**13. Calendarios y horarios:**

ver <http://www.ubu.es>

**14. Idioma en que se imparte:**

Castellano