



GUÍA DOCENTE 2017-2018

Química Computacional.

La química computacional es una disciplina que se extiende mas allá de los limites tradicionales que separan la química, la física, la biología y la ciencia de la computación, permitiendo la investigación de átomos, moléculas y macromoléculas mediante un sistema de ordenadores o, actualmente, incluso con un solo ordenador.

La química computacional es necesaria para corroborar diversos resultados experimentales, completando la investigación, e incluso se convierte en prioritaria cuando la investigación de laboratorio sea inapropiada, impracticable o imposible.

La química computacional incluye aspectos como:

- El modelado molecular.
- Los métodos computacionales.
- El diseño molecular asistido por ordenador.
- Las bases de datos químicas.
- El diseño de síntesis orgánica.
- La búsqueda de datos en bases químicas.

Aunque hay distintas definiciones de química computacional quizá la mas apropiada sea la dada por Lipkowitz y Boyd: “Aquellos aspectos de la química que son explicados o realizados mediante ordenadores”.

En este curso se describen distintas formas de resolver problemas químicos con el uso de herramientas mecanocuánticas. Tras breves introducciones a las distintas metodologías los estudiantes aplican lo aprendido a sistemas químicos mediante simulación en ordenador.



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

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)

Optativa

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
- Comprensión de las principales ideas y conceptos químicos en los que se basan los diferentes modelos computacionales utilizados. - Habilidad en la utilización de paquetes de software especializados como Gaussian, muy extendido en la comunidad científica debido a la obtención de excelentes resultados comparables con los experimentos. - Utilización de los programas de visualización y análisis adecuados para analizar los resultados de los cálculos computacionales realizados. - Realización de pequeñas simulaciones computacionales en sistemas de gran interés en la actualidad en Química. -Comprensión de las publicaciones científicas que, dentro de su campo de investigación, utilizan técnicas de Química Computacional.
10.2- Unidades docentes (Bloques de contenidos)
Unidad 1. Introducción. Visión general de las técnicas de simulación. Unidad 2. Mecánica molecular. Campos de fuerza y su parametrización. 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 , (2015) Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods, Third Edition, Gaussian, Incorporated, UNITED STATES, 978-1-935522-03-4,

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:

La metodología de la asignatura será eminentemente práctica y aplicada, realizando simulaciones de diversas moléculas, complejos y materiales, de gran importancia en la Química actual. Trabajo colaborativo entre los estudiantes.

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	CB6,CB7,CB8,CB9, CB10,CE1, CE7	5	15	20
Total		45	80	125



12. Sistemas de evaluación:

Primera convocatoria.

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

Segunda convocatoria.

El único procedimiento no recuperable en la Segunda Convocatoria es la realización de prácticas en el aula de ordenadores. La calificación de este procedimiento en segunda convocatoria será la obtenida en primera convocatoria.

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

Los estudiantes que fueran sorprendidos copiando o plagiando en cualquiera de los procedimientos de evaluación de la asignatura tendrán una calificación de cero en la nota global de la asignatura, de acuerdo con el artículo 17.2 del Reglamento de Evaluación de la Universidad de Burgos.

Procedimiento	Peso primera convocatoria	Peso segunda convocatoria
A) Realización de las prácticas en aula de ordenadores. 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 mínima: 4 sobre 10.	0 %	40 %
C) Simulaciones en un sistema químico que puede ser elegido por el alumno. Calificación mínima: 4 sobre 10.	30 %	30 %
Total	100 %	100 %



Evaluación excepcional:

La evaluación excepcional consistirá en:

- 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%)

En cada uno de los procedimientos anteriormente indicados será necesario obtener un mínimo del 40% de la calificación máxima para poder aprobar la asignatura.

13. Calendarios y horarios:

La información se encuentra en la web del Máster en Química Avanzada.

14. Idioma en que se imparte:

Castellano