



UNIVERSIDAD DE BURGOS

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

GUÍA DOCENTE 2012-2013

Química Computacional

1. Denominación de la asignatura:

Química Computacional

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)

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

- C1. Manejo de Gaussian03 por el alumno.
- C2. Interpretación de la parte computacional de un artículo de investigación.
- C3. Extracción de la información relevante de los ficheros de salida de Gaussian03 por el alumno.
- C4. Capacidad del alumno para elaborar textos de carácter científico de fácil comprensión.

10. Programa de la asignatura

10.1- Objetivos docentes
Generales: OG1. Desarrollo de la creatividad del alumno. OG2. Fomento del espíritu crítico del alumno. OG3. Mejora de la capacidad del alumno para el trabajo en grupo. OG4. Búsqueda y obtención, por parte del alumno, de información en la bibliografía. Específicos: OE1. Comprensión de las principales ideas y conceptos químicos en los que se basan los diferentes modelos computacionales utilizados. OE2. 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. OE3. Capacitación del alumno para realizar pequeñas simulaciones computacionales en sistemas de gran interés en la actualidad en Química.
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, (1996) Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods, 2ª, Gaussian, Inc.,
M.P. Allen y D.J. Tildesley, (1987) Computer simulation of liquids, Oxford University Press: New York,

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

Gaussian, <http://www.gaussian.com/>.
Bases, <https://bse.pnl.gov/bse/portal>.
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,
C. J. Cramer, (2002) Essentials of Computational Chemistry, John Wiley & Sons,
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	C1-C3.	15	15	30
Clases prácticas en ordenador utilizando Gaussian03	C1, C3.	25	35	60
Simulaciones con Gaussian03 de sistemas de gran interés en Química y/o preferentes para el alumno.	C1-C3.	0	15	15
Seminarios y tutorías	C1-C4	5	15	20
Total		45	80	125

12. Sistemas de evaluación:

Actividades NO recuperables en segunda convocatoria:
a) Realización de las prácticas

Procedimiento	Peso en la calificación final
Realización de las prácticas. Calificación mínima: 4 sobre 10.	30 %
Resolución de ejercicios propuestos periódicamente. Calificación mínima: 4 sobre 10.	40 %
Simulaciones en un sistema químico que puede ser elegido por el alumno. Calificación mínima: 4 sobre 10.	30 %
Total	100 %



UNIVERSIDAD DE BURGOS

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

13. Calendarios y horarios:

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

14. Idioma en que se imparte:

Castellano