



DATOS IDENTIFICATIVOS

Química computacional

Asignatura	Química computacional			
Código	V11G201V01411			
Titulación	Grado en Química			
Descriptores	Creditos ECTS	Seleccione	Curso	Cuatrimestre
	6	OP	4	2c
Lengua	#EnglishFriendly			
Impartición	Castellano			
Departamento	Química Física			
Coordinador/a	Graña Rodríguez, Ana María			
Profesorado	Graña Rodríguez, Ana María			
Correo-e	ana@uvigo.es			
Web				
Descripción general	La Química *computacional es una disciplina que usa métodos matemáticos para el cálculo de propiedades moleculares o para la simulación del comportamiento molecular.			

Resultados de Formación y Aprendizaje

Código	
A1	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
B1	Capacidad de aprendizaje autónomo
B2	Capacidad de organización y planificación
C36	Conocer los fundamentos y ser capaz de emplear diferentes métodos de cálculo mecanocuántico aplicados a sistemas de interés en química
D1	Capacidad para resolver problemas

Resultados previstos en la materia

Resultados previstos en la materia	Resultados de Formación y Aprendizaje			
Describir los principales métodos de cálculo de la química *computacional, conociendo sus aplicaciones y limitaciones.				C36
Describir los elementos que puede contener un campo de fuerzas de mecánica molecular.				C36
Elegir niveles de cálculo *cuántico adecuados para el tratamiento de un problema químico.	A1	B2		C36
Describir *algoritmos fundamentales empleados en los cálculos de química *computacional.				C36
Obtener propiedades de interés químico haciendo uso de métodos *computacionais (estáticos y dinámicos).		B1	C36	D1
		B2		

Contenidos

Tema	
Tema 1. Introducción: métodos de cálculo en Química Computacional.	Mecánica molecular. Métodos Hartree-Fock. Métodos post Hartree-Fock. Teoría del funcional de la densidad. Métodos de dinámica molecular. Elección de método. Elección de conjunto base.
Tema 2. Estudios *conformacionais.	Superficies de energía potencial. Caracterización de puntos singulares. Optimización de geometrías. Optimización de estados de transición. Optimizaciones restringidas. Técnicas de conducción. Técnicas de muestreo conformacional. Métodos IRC.
Tema 3. Aplicación a la espectroscopía.	Espectros infrarrojos. Estados electrónicos excitados: espectros UV-visible. Espectros RMN.
Tema 4. Aplicaciones al cálculo de propiedades energéticas.	Propiedades termodinámicas. Error de superposición de base. Procesos isógiros, isotérmicos y homodesmóticos. Métodos Gn y CBS.

Tema 5. Aplicaciones a la reactividad química.	Índices de reactividad química. Dinámica de reacción. Cálculo de velocidades.
Tema 6. Modelos de solvatación.	Modelos de solvatación continuos. Inclusión explícita del disolvente. Métodos mixtos.
Tema 7. Aplicaciones a biomoléculas	Métodos de Mecánica Molecular. Métodos de Dinámica Molecular. Métodos híbridos QM/MM.

Planificación

	Horas en clase	Horas fuera de clase	Horas totales
Lección magistral	26	22	48
Prácticas con apoyo de las TIC	14	14	28
Resolución de problemas	6	18	24
Resolución de problemas y/o ejercicios	6	18	24
Trabajo	0	26	26

*Los datos que aparecen en la tabla de planificación son de carácter orientativo, considerando la heterogeneidad de alumnado

Metodologías

	Descripción
Lección magistral	Exposición por parte de la profesora de conceptos teóricos y prácticos.
Prácticas con apoyo de las TIC	Prácticas computacionales.
Resolución de problemas	Resolución de problemas por parte del alumnado con asistencia *computacional.

Atención personalizada

Metodologías	Descripción
Lección magistral	El alumnado podrá acudir a las tutorías personalizadas para resolver dudas. Estas tutorías presenciales deben ser solicitadas personalmente o por correo electrónico a la profesora.
Resolución de problemas	El alumnado podrá acudir a las tutorías personalizadas para resolver dudas. Estas tutorías presenciales deben ser solicitadas personalmente o por correo electrónico a la profesora.
Prácticas con apoyo de las TIC	El alumnado podrá acudir a las tutorías personalizadas para resolver dudas. Estas tutorías presenciales deben ser solicitadas personalmente o por correo electrónico a la profesora.
Pruebas	Descripción
Resolución de problemas y/o ejercicios	El alumnado podrá acudir a las tutorías personalizadas para resolver dudas. Estas tutorías presenciales deben ser solicitadas personalmente o por correo electrónico a la profesora.
Trabajo	El alumnado podrá acudir a las tutorías personalizadas para resolver dudas. Estas tutorías presenciales deben ser solicitadas personalmente o por correo electrónico a la profesora.

Evaluación

	Descripción	Calificación		Resultados de Formación y Aprendizaje		
Resolución de problemas	Informe de los ejercicios de los temas 1 a 3	30	A1	B1	C36	D1
Resolución de problemas y/o ejercicios	Informe de los ejercicios de los temas 4 a 7	40	A1	B1	C36	D1
Trabajo	Informe de prácticas	30	A1	B1	C36	D1
				B2		

Otros comentarios sobre la Evaluación

Fuentes de información

Bibliografía Básica

J. B. Foresman, A. Frisch, **Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods**, 3, Gaussian Inc, 2015

Frank Jensen, **Introduction to computational chemistry**, 2, Wiley, 2006

Joan Bertran Rusca, Vicenç Branchadell Gallo, Miquel Moreno Ferrer, Mariona Sodupe Roure, **Química Cuántica**, 1, Síntesis, 2000

Bibliografía Complementaria

A. Szabo, N. S. Ostlund, **Modern Quantum Chemistry**, 1, Dover, 1996

Recomendaciones

Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente

Física: Física I/V11G201V01102

Física: Física II/V11G201V01107

Matemáticas: Matemáticas I/V11G201V01103

Matemáticas: Matemáticas II/V11G201V01108

Química física III: Química cuántica/V11G201V01303

Química física IV: Estructura molecular y espectroscopia/V11G201V01307
