



DATOS IDENTIFICATIVOS

Química computacional

Materia	Química computacional			
Código	V11G201V01411			
Titulación	Grao en Química			
Descritores	Creditos ECTS	Sinale	Curso	Cuadrimestre
	6	OP	4	2c
Lingua de impartición	#EnglishFriendly Castelán			
Departamento	Química Física			
Coordinador/a	Graña Rodríguez, Ana María			
Profesorado	Graña Rodríguez, Ana María			
Correo-e	ana@uvigo.es			
Web				
Descrición xeral	A Química computacional é unha disciplina que usa métodos matemáticos para o cálculo de propiedades moleculares ou para a simulación do comportamento molecular.			

Resultados de Formación e Aprendizaxe

Código	
A1	Que os estudantes saiban aplicar os seus coñecementos ó seu traballo ou vocación dunha forma profesional e posúan as competencias que adoitan demostrarse por medio da elaboración e defensa de argumentos e a resolución de problemas dentro da súa área de estudo
B1	Capacidade de aprendizaxe autónomo
B2	Capacidade de organización y planificación
C36	Coñecer os fundamentos e ser capaz de empregar diferentes métodos de cálculo mecanocuántico aplicados á sistemas de interese en química
D1	Capacidade para resolver problemas

Resultados previstos na materia

Resultados previstos na materia	Resultados de Formación e Aprendizaxe			
Describir os principais métodos de cálculo da química computacional, coñecendo as súas aplicacións e limitacións.				C36
Describir os elementos que pode conter un campo de forzas de mecánica molecular.				C36
Elixir niveis de cálculo cuántico adecuados para o tratamento dun problema químico.	A1	B2		C36
Describir algoritmos fundamentais empregados nos cálculos de química computacional.				C36
Obter propiedades de interese químico facendo uso de métodos computacionais (estáticos e dinámicos).		B1	C36	D1
		B2		

Contidos

Tema	
Tema 1. Introducción: métodos de cálculo en Química Computacional.	Mecánica molecular. Métodos Hartree-Fock. Métodos post Hartree-Fock. Teoría do funcional da densidade. Métodos de dinámica molecular. Elección de método. Elección de conxunto base.
Tema 2. Estudos conformacionais.	Superficies de enerxía potencial. Caracterización de puntos singulares. Optimización de xeometrías. Optimización de estados de transición. Optimizacións restringidas. Técnicas de conducción. Técnicas de muestreo conformacionais. Métodos IRC.
Tema 3. Aplicación á espectroscopía.	Espectros infravermellos. Estados electrónicos excitados: espectros UV-visible. Espectros RMN.
Tema 4. Aplicacións ao cálculo de propiedades energéticas.	Propiedades termodinámicas. Error de superposición de base. Procesos isóxiros, isotérmicos e homodesmóticos. Métodos Gn e CBS.

Subject 5. Applications to the chemical reactivity. Chemical reactivity indices. Reaction dynamics. Calculation of reaction rates.

Tema 6. Modelos de solvatación.	Modelos de solvatación continuos. Inclusión explícita del disolvente. Métodos mixtos.
Tema 7. Aplicacións a biomoléculas	Métodos de Mecánica Molecular. Métodos de Dinámica Molecular. Métodos híbridos QM/MM.

Planificación

	Horas na aula	Horas fóra da aula	Horas totais
Lección maxistral	26	22	48
Prácticas con apoio das TIC	14	14	28
Resolución de problemas	6	18	24
Resolución de problemas e/ou exercicios	6	18	24
Traballo	0	26	26

*Os datos que aparecen na táboa de planificación son de carácter orientador, considerando a heteroxeneidade do alumnado.

Metodoloxía docente

	Descrición
Lección maxistral	Exposición por parte da profesora de conceptos teóricos e prácticos.
Prácticas con apoio das TIC	Prácticas computacionais.
Resolución de problemas	Resolución de problemas por parte do alumnado con asistencia computacional.

Atención personalizada

Metodoloxías	Descrición
Lección maxistral	O alumnado poderá acudir a titorías personalizadas para resolver dúbidas. Estas titorías presenciais deben ser solicitadas personalmente ou por correo electrónico á profesora.
Resolución de problemas	O alumnado poderá acudir a titorías personalizadas para resolver dúbidas. Estas titorías presenciais deben ser solicitadas personalmente ou por correo electrónico á profesora.
Prácticas con apoio das TIC	O alumnado poderá acudir a titorías personalizadas para resolver dúbidas. Estas titorías presenciais deben ser solicitadas personalmente ou por correo electrónico á profesora.
Probas	Descrición
Resolución de problemas e/ou exercicios	O alumnado poderá acudir a titorías personalizadas para resolver dúbidas. Estas titorías presenciais deben ser solicitadas personalmente ou por correo electrónico á profesora.
Traballo	O alumnado poderá acudir a titorías personalizadas para resolver dúbidas. Estas titorías presenciais deben ser solicitadas personalmente ou por correo electrónico á profesora.

Avaliación

	Descrición	Cualificación		Resultados de Formación e Aprendizaxe		
Resolución de problemas	Informe dos exercicios dos temas 1 a 3	30	A1	B1 B2	C36	D1
Resolución de problemas e/ou exercicios	Informe dos exercicios dos temas 4 a 7	40	A1	B1 B2	C36	D1
Traballo	Informe de prácticas	30	A1	B1 B2	C36	D1

Outros comentarios sobre a Avaliación

Bibliografía. Fontes 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

Recomendacións

Materias que se recomienda ter 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: Estrutura molecular y espectroscopia/V11G201V01307
