

60625 - Química teórica y computacional

Información del Plan Docente

Año académico	2016/17
Centro académico	100 - Facultad de Ciencias
Titulación	542 - Máster Universitario en Investigación Química
Créditos	3.0
Curso	1
Periodo de impartición	Segundo Semestre
Clase de asignatura	Optativa
Módulo	---

1. Información Básica

1.1. Recomendaciones para cursar esta asignatura

1.2. Actividades y fechas clave de la asignatura

El calendario correspondiente al curso así como las fechas y horarios de clases y exámenes de la asignatura se pueden consultar en la página web de la Facultad de Ciencias.

Las fechas correspondientes a los seminarios, prácticas y presentación de los trabajos se indicarán a lo largo del curso.

2. Inicio

2.1. Resultados de aprendizaje que definen la asignatura

El estudiante, para superar esta asignatura, deberá demostrar los siguientes resultados...

Que ha adquirido los conceptos básicos y ha aprendido el manejo de programas informáticos propios de la Química Teórica y Computacional

Que es capaz de llevar a cabo cálculos computacionales basados en modelos teóricos de estructura electrónica.

Que es capaz de estudiar nuevos problemas químicos de manera racional basados en resultados obtenidos mediante técnicas de la Química Cuántica.

Que es capaz de seleccionar la herramienta teórica más adecuada para el estudio de un problema químico o químico-físico determinado.

Que es capaz de aplicar las técnicas de la Química Cuántica a la resolución de problemas químicos de interés científico mediante el uso de programas informáticos.

2.2. Introducción

Breve presentación de la asignatura

60625 - Química teórica y computacional

Asignatura optativa del módulo especializado a impartir en el segundo cuatrimestre, con 3 créditos ECTS. El 50% de las actividades presenciales son teóricas y el otro 50% es práctico. Cada alumno realizará también un trabajo individual que expondrá luego a la clase. La asignatura tiene como función principal proporcionar a los alumnos una formación básica y general en la realización de cálculos basados en los métodos teóricos de estructura electrónica abriendo la posibilidad de que el alumno pueda llevar a cabo en adelante cálculos más avanzados y/o concretos en el tema (o problema) de su interés.

3.Contexto y competencias

3.1.Objetivos

La asignatura y sus resultados previstos responden a los siguientes planteamientos y objetivos:

- Conocer los métodos teóricos de cálculo de la Química Cuántica, su ámbito de aplicación y sus limitaciones.
- Manejar programas informáticos propios de cálculo de estructura electrónica molecular.
- Dentro de ese contexto seleccionar la herramienta teórica más adecuada para el problema químico objeto de estudio.
- Proponer modelos de procesos químicos y llevar a cabo los cálculos computacionales.

3.2.Contexto y sentido de la asignatura en la titulación

La asignatura se ubica en el Módulo Especializado ya que trata de contenidos que pueden complementar los estudios de las otras áreas. La realización de cálculos teóricos es de interés en todas las áreas de la Química pues se emplean, por ejemplo, para interpretar y racionalizar resultados, para tener una idea de la estructura molecular (geometría) de una molécula, la distribución de densidad electrónica en la misma, la posible reactividad y otras propiedades moleculares, o explorar el camino seguido por una reacción, etc. Pero también a veces se utilizan para predecir la estructura y las propiedades moléculas no sintetizadas con objeto de conocer si tal o tales moléculas serían adecuadas para los fines deseados.

3.3.Competencias

Al superar la asignatura, el estudiante será más competente para...

Conocer los métodos teóricos de cálculo de la Química Cuántica, su ámbito de aplicación y sus limitaciones

Manejar programas informáticos propios de cálculo de estructura electrónica molecular, utilizando las interfaces de visualización para la introducción de los datos de problema a calcular y para el análisis de los resultados obtenidos.

Dentro de ese contexto seleccionar la herramienta teórica más adecuada para el problema químico objeto de estudio

Proponer modelos de problemas químicos (relacionados con la estructura molecular, la espectroscopia, la fotoquímica, o la reactividad química) y llevar a cabo los cálculos computacionales

3.4.Importancia de los resultados de aprendizaje

En esta asignatura el alumno aprenderá a manejar programas de cálculo con ordenador para el estudio químico cuántico de moléculas (métodos de estructura electrónica), y a hacerlo con criterio. La disponibilidad de ordenadores con bastante potencia de cálculo a coste reducido, así como la existencia de programas informáticos de cálculo con interfaces

60625 - Química teórica y computacional

sencillas para los usuarios (con programas de visualización que permiten la visualización fácil de datos de entrada y de resultados) hace que los cálculos computacionales sean una herramienta común para los químicos experimentales de todas las áreas.

Como ya se ha mencionado la realización de cálculos teóricos es de interés en todas las áreas de la Química pues se emplean, por ejemplo, para interpretar y racionalizar resultados, para tener una idea de la estructura molecular (geometría) de una molécula, la distribución de densidad electrónica en la misma, la posible reactividad y otras propiedades moleculares, o explorar el camino seguido por una reacción, etc. Pero también a veces se utilizan para predecir la estructura y las propiedades moléculas no sintetizadas con objeto de conocer si tal o tales moléculas serían adecuadas para los fines deseados.

4. Evaluación

El estudiante deberá demostrar que ha alcanzado los resultados de aprendizaje previstos mediante las siguientes actividades de evaluación

1. Evaluación del trabajo realizado en las clases prácticas en el aula informática *in situ*, y mediante los informes o cuestionarios realizados sobre las mismas. La asistencia a prácticas es obligatoria, así como la presentación de los informes (o cuestionarios) que habrán de entregarse dentro del plazo establecido por el profesor para cada práctica o tarea. Este bloque supondrá entre el 50% de la calificación final.

2. Realización y exposición de un trabajo individual por parte del alumno. La calificación de este segundo bloque supondrá el 50% de la calificación final.

Según normativa de evaluación, el estudiante que no opte por la evaluación continua o que no supere la asignatura por este procedimiento o que quisiera mejorar su calificación, tendrá derecho a presentarse a la prueba global, prevaleciendo, en cualquier caso, la mejor de las calificaciones obtenidas.

El número de convocatorias oficiales de examen a las que la matrícula da derecho, así como el sistema de evaluación y calificación se ajustarán a la normativa vigente en la Universidad de Zaragoza.

http://wzar.unizar.es/servicios/maste/docum/rto_%20permanencia14.pdf

<http://wzar.unizar.es/servicios/coord/norma/evalu/evalu.html>

5. Actividades y recursos

5.1. Presentación metodológica general

El proceso de aprendizaje que se ha diseñado para esta asignatura se basa en lo siguiente:

- Clases magistrales participativas en grupo "grande" en las que el profesor expondrá los contenidos teóricos con la ayuda de medios audiovisuales y recomendando los libros que considere más adecuados para el trabajo posterior del alumno y la comprensión de los temas.

- Clases prácticas en aula informática: el alumno realizará de forma individualizada cálculos teóricos con aplicaciones informáticas de Química Teórica y Computacional de problemas propuestos. El alumno estará atendido y guiado por el profesor, que atenderá a grupos reducidos.

- Un trabajo individual práctico a realizar por cada alumno que además de elaborarlo y realizar los correspondientes

60625 - Química teórica y computacional

cálculos deberá exponer en clase.

5.2. Actividades de aprendizaje

El programa que se ofrece al estudiante para ayudarle a lograr los resultados previstos comprende las siguientes actividades...

Actividad formativa 1: Clases magistrales participativas en grupo "grande" en las que el profesor expondrá los contenidos teóricos con la ayuda de medios audiovisuales y recomendando los libros que considere más adecuados para el trabajo posterior del alumno y la comprensión de los temas. 15 horas presenciales.

Actividad Formativa 2: Clases prácticas en aula informática: el alumno realizará de forma individualizada cálculos teóricos con aplicaciones informáticas de Química Teórica y Computacional de problemas propuestos. El alumno estará atendido y guiado por el profesor, que atenderá a grupos reducidos. 15 horas presenciales.

Actividad Formativa 3 : Un trabajo individual práctico a realizar por cada alumno que además de elaborarlo y realizar los correspondientes cálculos deberá exponer en clase. Trabajo estimado en 45 horas.

5.3. Programa

1. Fundamentos de la Química Teórica y Computacional

- Introducción a la estructura molecular. Teoría de orbitales moleculares. Método de Hückel: deslocalización electrónica, energía de resonancia y aromaticidad.
- Método de Hartree-Fock. Métodos más avanzados: correlación electrónica y teoría del funcional de la densidad. Sistemas electrónicos degenerados.
- Conjuntos de funciones de base. Métodos de cálculo de propiedades moleculares.

2. Aplicaciones de la Química Teórica y Computacional

- Cálculo de superficies de energía potencial en sistemas gaseosos
- Determinación de puntos estacionarios en reacciones químicas complejas
- Estudios teóricos de propiedades electrónicas de moléculas
- Cálculo de sistemas electrónicos de capa abierta
- Interacciones moleculares: enlace de hidrógeno

5.4. Planificación y calendario

Calendario de sesiones presenciales y presentación de trabajos

60625 - Química teórica y computacional

El calendario correspondiente al curso así como las fechas y horarios de clases y exámenes de la asignatura se pueden consultar en la página web de la facultad de Ciencias.

El calendario de clases prácticas se publicará con antelación y se elaborará según la disponibilidad de aula informática adecuada para el tipo de trabajo a realizar en la asignatura y en coordinación con otras posibles prácticas de los alumnos en la medida de lo posible.

5.5. Bibliografía y recursos recomendados

- BIBLIOGRAFÍA BÁSICA
 - Química Cuántica. J. Bertran Rusca, V. Branchadell Gallo, M. Moreno Ferrer, M. Sodupe Roure. Editorial Síntesis 2002.
 - Química Cuántica, I. N. Levine. Editorial Prentice may. Madrid 2001.
 - Introduction to Computational Chemistry (2nd edition). F. Jensen, John Wiley and Sons, Chichester, 2007.
 - Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models (2nd edition). C. J. Cramer. John Wiley and Sons, 2004.
 - Molecular Modeling Basics. J. H. Jensen, CRC Press. Boca Raton, 2010
- BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA
 - 1. (Muy avanzado) Química Cuántica Moderna - Szabo Ostlund