



1. Identificación

1.1. De la Asignatura

Curso Académico	2014/2015
Titulación	MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA FINA Y MOLECULAR
Nombre de la Asignatura	QUÍMICA TEÓRICA Y COMPUTACIONAL
Código	5434
Curso	PRIMERO
Carácter	OPTATIVA
Nº Grupos	1
Créditos ECTS	3
Estimación del volumen de trabajo del alumno	75
Organización Temporal/Temporalidad	Segundo Cuatrimestre
Idiomas en que se imparte	ESPAÑOL
Tipo de Enseñanza	Presencial

1.2. Del profesorado: Equipo Docente

Coordinador de la asignatura JESUS ANGEL GALVEZ MORILLAS Grupo: 1	Área/Departamento	QUÍMICA FÍSICA
	Categoría	CATEDRATICOS DE UNIVERSIDAD
	Correo	jgalvez@um.es
	Electrónico / Página web / Tutoría electrónica	Tutoría Electrónica: NO



	Teléfono, Horario y	Duración	Día	Horario	Lugar
	Lugar de atención	Segundo	Miércoles	11:00- 12:00	868887425,
	al alumnado	Cuatrimestre			Facultad de Química
		Segundo	Jueves	11:00- 12:00	868887425,
		Cuatrimestre			Facultad de Química

2. Presentación

Química Teórica y Computacional es una asignatura de carácter optativo que se imparte en el Grado de Master, consta de 3 créditos ECTS, y tiene una duración cuatrimestral. La química computacional es una rama de la Química que ha adquirido cuerpo de identidad propio a partir de la década de los noventa del siglo pasado. Utiliza ordenadores para ayudar a resolver problemas químicos mediante “modelizaciones” del sistema que pueden llegar a ser verdaderos “experimentos teóricos”. Para ello, los resultados de la química teórica se incorporan a programas informáticos que permiten calcular las estructuras y propiedades de moléculas, así como aplicarlos al estudio de los estados líquido y sólido. Sus resultados normalmente complementan la información obtenida en experimentos químicos, pero en muchos casos pueden predecir fenómenos químicos no observados hasta la fecha.

La asignatura tiene un enfoque eminentemente práctico que se concreta en un número reducido de clases teóricas en el aula para pasar lo antes posible a la discusión y análisis de los resultados teóricos obtenidos en sistemas concretos de distinta complejidad, y su comparación (en los casos que sea posible) con los correspondientes valores experimentales.

3. Condiciones de acceso a la asignatura

3.1 Incompatibilidades

Ninguna

3.2 Recomendaciones



4. Competencias de la asignatura y su relación con las competencias de la titulación

Competencia 1. Disponer de un conocimiento avanzado de métodos de cálculo electrónico ab initio para la determinación de la estructura molecular.

- CBM-4. Posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.
- CGM-1. Adquirir conocimientos avanzados en los diferentes campos de la Química Fina y Molecular.
- CGM-3. Capacidad para estar actualizados e interpretar críticamente la teoría y práctica de la Química Fina y Molecular.
- CGM-5. Capacidad de interpretar los resultados de la investigación en química.
- CGM-14. Habilidades relacionadas con las tecnologías de la información y la comunicación en Química.
- CGM-15. Adquirir las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar formándose para enfrentarse con garantías de éxito a sus retos científicos y profesionales.
- CGM-16. Capacidad para la elaboración y defensa de proyectos
- CEM-8. Capacidad para entender los mecanismos de reacción en la síntesis de compuestos químicos y diseñar rutas sintéticas que permitan obtener los compuestos buscados.
- CME-12. Ser capaces de relacionar la estructura con las propiedades físicas y químicas de nuevos compuestos químicos
- CEM-14-13. Adquirir un conocimiento avanzado de la reactividad de los compuestos de coordinación y sus potenciales aplicaciones.

Competencia 2. Conocer y manejar los métodos basados en la teoría del funcional de la densidad.

- CBM-4. Posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.
- CGM-1. Adquirir conocimientos avanzados en los diferentes campos de la Química Fina y Molecular.
- CGM-5. Capacidad de interpretar los resultados de la investigación en química.
- CGM-14. Habilidades relacionadas con las tecnologías de la información y la comunicación en Química.
- CGM-15. Adquirir las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar formándose para enfrentarse con garantías de éxito a sus retos científicos y profesionales.
- CGM-16. Capacidad para la elaboración y defensa de proyectos
- CEM-8. Capacidad para entender los mecanismos de reacción en la síntesis de compuestos químicos y diseñar rutas sintéticas que permitan obtener los compuestos buscados.
- CME-12. Ser capaces de relacionar la estructura con las propiedades físicas y químicas de nuevos compuestos químicos
- CEM-14-13. Adquirir un conocimiento avanzado de la reactividad de los compuestos de coordinación y sus potenciales aplicaciones.

Competencia 3. Desarrollar técnicas de modelización y simulación de sistemas químicos basadas en los métodos de dinámica Browniana, dinámica molecular y Montecarlo.

- CBM-4. Posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.
- CGM-1. Adquirir conocimientos avanzados en los diferentes campos de la Química Fina y Molecular.
- CGM-3. Capacidad para estar actualizados e interpretar críticamente la teoría y práctica de la Química Fina y Molecular.
- CGM-5. Capacidad de interpretar los resultados de la investigación en química.
- CGM-14. Habilidades relacionadas con las tecnologías de la información y la comunicación en Química.
- CGM-15. Adquirir las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar formándose para enfrentarse con garantías de éxito a sus retos científicos y profesionales.
- CGM-16. Capacidad para la elaboración y defensa de proyectos
- CEM-8. Capacidad para entender los mecanismos de reacción en la síntesis de compuestos químicos y diseñar rutas sintéticas que permitan obtener los compuestos buscados.
- CME-12. Ser capaces de relacionar la estructura con las propiedades físicas y químicas de nuevos compuestos químicos
- CEM-14-13. Adquirir un conocimiento avanzado de la reactividad de los compuestos de coordinación y sus potenciales aplicaciones.

Competencia 4. Conocer los procedimientos que permiten la resolución analítica y/o numérica de las ecuaciones que rigen los procesos cinético-difusivos

- CBM-4. Posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.
- CGM-1. Adquirir conocimientos avanzados en los diferentes campos de la Química Fina y Molecular.
- CGM-3. Capacidad para estar actualizados e interpretar críticamente la teoría y práctica de la Química Fina y Molecular.
- CGM-5. Capacidad de interpretar los resultados de la investigación en química.
- CGM-14. Habilidades relacionadas con las tecnologías de la información y la comunicación en Química.
- CGM-15. Adquirir las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar formándose para enfrentarse con garantías de éxito a sus retos científicos y profesionales.
- CGM-16. Capacidad para la elaboración y defensa de proyectos
- CEM-8. Capacidad para entender los mecanismos de reacción en la síntesis de compuestos químicos y diseñar rutas sintéticas que permitan obtener los compuestos buscados.
- CME-12. Ser capaces de relacionar la estructura con las propiedades físicas y químicas de nuevos compuestos químicos
- CEM-14-13. Adquirir un conocimiento avanzado de la reactividad de los compuestos de coordinación y sus potenciales aplicaciones.



5. Contenidos

TEMA 1 La ecuación de Schrodinger. El hamiltoniano molecular. La aproximación de Born-Oppenheimer.

TEMA 2 Métodos ab initio. Conjunto de funciones base. Método Hartree-Fock. Teoría de perturbaciones de Moller-Plesset. Interacción de configuración.

TEMA 3 Teoría del funcional de densidad. Teorema de Hohenberg-Kohn. Método de Kohn-Sham. Funcionales de intercambio y correlación.

TEMA 4 Cálculos en moléculas. Optimización de la geometría. Cálculos de energía de punto único. Cálculo de propiedades moleculares.

TEMA 5 Reactividad química. Caracterización de puntos estacionarios. Mínimos y estados de transición. Superficies de energía potencial. Trayectorias de reacción. Energías de activación.

TEMA 6 Procesos cinético-difusivos. Ecuaciones diferenciales en derivadas parciales. Métodos analíticos de integración. Transformada de Laplace. Solución en series de potencias. Ejemplos.

TEMA 7 Ecuaciones diferenciales en derivadas parciales. Métodos numéricos de integración. Método de las diferencias finitas. Ejemplos.

6. Metodología Docente

Actividad Formativa	Metodología	Horas Presenciales	Trabajo Autónomo	Volumen de trabajo
Lección magistral	Presentación en el aula de los conceptos y procedimientos asociados a la materia.	18	18	36
Seminarios	Actividades en el aula para el seguimiento individual o en grupo de la adquisición de las competencias de la materia	4	4	8
Actividades prácticas	Realización de prácticas de laboratorio y de microaula	6	6	12
Tutorías	Tutorías en grupo para contrastar los avances en la adquisición de las competencias de la materia	2		2



Actividad Formativa	Metodología	Horas Presenciales	Trabajo Autónomo	Volumen de trabajo
Actividades individuales	Lectura crítica de artículos de investigación		17	17
	Total	30	45	75

7. Horario de la asignatura

<http://www.um.es/web/quimica/contenido/estudios/masteres/quimica-fina/2014-15#horarios>

8. Sistema de Evaluación

Competencia Evaluada	Métodos / Instrumentos	Los conocimientos adquiridos en las clases magistrales se evaluarán mediante pruebas escritas
	Criterios de Valoración	Se valorarán tanto los conocimientos adquiridos como la capacidad de presentación de los mismos
	Ponderación	90%
Competencia Evaluada	Métodos / Instrumentos	Los seminarios y tutorías se evaluarán de forma continua
	Criterios de Valoración	Se valorará la participación activa de los alumnos
	Ponderación	10%

Fechas de exámenes

<http://www.um.es/web/quimica/contenido/estudios/masteres/quimica-fina/2014-15#exámenes>

9. Bibliografía (básica y complementaria)



A Computational Approach to Chemistry. D. M. Hirst. Cambridge University Press (1990)



A Guide to Molecular Mechanics and Quantum Chemical Calculations, W.J. Hehre, Wavefunctions, Inc. Irvine, CA 2003



Computer Software Applications in Chemistry. P. C. Jurs. John Wiley and Sons (1991).



[Transient Techniques in Electrochemistry. D. D. MacDonald. Plenum Press \(1981\).](#)



Introduction to Computational Chemistry. F. Jensen. John Wiley and Sons (1999).



Monte Carlo Methods. Vol. I. Basics. M. H. Kalos y P. A. Whitlock. John Wiley and SOns (1986).



Numerical Recipes. W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky y W. T. Vetterling. Blackwells (1990).



Density Functional Methods in Chemistry and Material Science. M. Springborg (ed.) John Wiley and Sons (1997).

10. Observaciones y recomendaciones