



## 1. Identificación

### 1.1. De la Asignatura

Curso Académico	2019/2020
Titulación	MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA FINA Y MOLECULAR
Nombre de la Asignatura	QUÍMICA TEÓRICA Y COMPUTACIONAL
Código	5434
Curso	PRIMERO
Carácter	OPTATIVA
N.º Grupos	1
Créditos ECTS	3
Estimación del volumen de trabajo del alumno	75
Organización Temporal/Temporalidad	Cuatrimestre
Idiomas en que se imparte	ESPAÑOL
Tipo de Enseñanza	Presencial

### 1.2. Del profesorado: Equipo Docente

Coordinación de la asignatura FRANCISCO ASIS MAXIMO MARTINEZ ORTIZ	Área/Departamento	QUÍMICA FÍSICA
	Categoría	CATEDRATICOS DE UNIVERSIDAD
	Correo Electrónico /	fmortiz@um.es
	Página web / Tutoría electrónica	www.um.es/dp-quimica-fisica/ Tutoría Electrónica: Sí



Grupo de	Teléfono, Horario y	Duración	Día	Horario	Lugar
Docencia: 1	Lugar de atención al alumnado	Anual	Viernes	11:00- 15:00	868887419, Facultad de Química B1.2B.009
Coordinación de los grupos:1		Anual	Viernes	11:00- 15:00	868887419, Facultad de Química B1.2B.009

## 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

No consta



## 3.2 Recomendaciones

## 4. Competencias

### 4.1 Competencias Básicas

- CB10. Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.
- CB6. Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación
- CB7. Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio
- CB8. Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios
- CB9. Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades

### 4.2 Competencias de la titulación

- CG1. Adquirir conocimientos avanzados en los diferentes campos de la Química Fina y Molecular.
- CG2. Saber reconocer que algunos de los retos actuales más importantes para el crecimiento del tejido económico de un país los constituyen industrias vinculadas a la Química Fina y Molecular: industrias farmacéuticas, agroquímicas, cosméticos, biomedicina, etc.
- CG3. Capacidad para estar actualizados e interpretar críticamente la teoría y práctica de la Química Fina y Molecular.
- CG4. Habilidades para desarrollar estrategias, tanto en el ámbito de la investigación básica como en la industria química, en los campos científicos de Química Fina y Molecular.
- CG5. Capacidad de interpretar los resultados de la investigación en química.
- CG6. Capacidad para innovar, desarrollar y/o mejorar técnicas y/o metodologías aplicables a la resolución de un problema concreto.
- CG7. Originalidad y creatividad en el empleo de la Química Fina y Molecular.
- CG8. Poseer capacidad de tomar decisiones en función de los resultados obtenidos.
- CG9. Habilidades interpersonales y de trabajo en equipo indispensables para llevar a cabo investigación dentro de un Grupo.
- CG10. Adquirir capacidad para relacionarse con personas especializadas en entornos científicos relacionados, indispensables para desarrollar innovaciones o investigaciones multidisciplinares de calidad.
- CG11. Adquirir la capacidad de comprender y asimilar el contenido de las publicaciones científicas relacionadas con los campos de investigación en Química Fina y Molecular.
- CG12. Ser capaz de reflexionar sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos.
- CG13. Ser capaces de aplicar los conocimientos y capacidades adquiridos para reconocer los retos actuales más importantes en Química Fina y Molecular.
- CG14. Habilidades relacionadas con las tecnologías de la información y la comunicación en Química.
- CG15. Adquirir las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar formándose para enfrentarse con garantías de éxito a sus retos científicos y profesionales.
- CG16. Capacidad para la elaboración y defensa de proyectos.



### 4.3 Competencias transversales y de materia

- Competencia 1. Disponer de un conocimiento avanzado de métodos de cálculo electrónico ab initio para la determinación de la estructura molecular.
- Competencia 2. Conocer y manejar los métodos basados en la teoría del funcional de la densidad.
- Competencia 3. Desarrollar técnicas de modelización y simulación de sistemas químicos basadas en los métodos de dinámica Browniana, dinámica molecular y Montecarlo.
- Competencia 4. Conocer los procedimientos que permiten la resolución analítica y/o numérica de las ecuaciones que rigen los procesos cinético-difusivos

## 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.	6	12	18



Actividad Formativa	Metodología	Horas Presenciales	Trabajo Autónomo	Volumen de trabajo
Seminarios	Actividades en el aula para el seguimiento individual o en grupo de la adquisición de las competencias de la materia	5	5	10
Actividades prácticas	Realización de prácticas de laboratorio y de microaula	6	12	18
Tutorías	Tutorías en grupo para contrastar los avances en la adquisición de las competencias de la materia	5		5
Actividades individuales	Lectura crítica de artículos de investigación		16	16
Evaluación	Prueba escrita: se valorarán tanto los conocimientos adquiridos en las clases magistrales como la capacidad de presentación de los mismos	2	6	8
	Total	24	51	75

## 7. Horario de la asignatura

<http://www.um.es/web/quimica/contenido/estudios/masteres/quimica-fina/2019-20#horarios>

## 8. Sistema de Evaluación

Métodos / Instrumentos	Pruebas escritas (exámenes): pruebas objetivas, de desarrollo, de respuesta corta, de ejecución de tareas, de escala de actitudes realizadas por los alumnos para mostrar los conocimientos teóricos y prácticos adquiridos.
Criterios de Valoración	
Ponderación	0



Métodos / Instrumentos	Informes escritos, trabajos y proyectos: trabajos escritos, portafolios, etc., con independencia de que se realicen individual o grupalmente.
Criterios de Valoración	
Ponderación	0
Métodos / Instrumentos	Procedimientos de observación del trabajo del estudiante: registros de participación, de realización de actividades, cumplimiento de plazos, participación en foros
Criterios de Valoración	
Ponderación	0

### Fechas de exámenes

<http://www.um.es/web/quimica/contenido/estudios/masteres/quimica-fina/2019-20#exámenes>

## 9. Resultados del Aprendizaje

Los conocimientos adquiridos en las clases magistrales se evaluarán mediante pruebas escritas y ejercicios prácticos. Se valorarán tanto los conocimientos adquiridos como la capacidad de presentación de los mismos.





Ponderación 90%

Los seminarios y tutorías se evaluarán de forma continua. Se valorará la participación activa de los alumnos.

Ponderación 10%

## 10. Bibliografía

### Bibliografía Básica

-  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
-  [Introduction to Computational Chemistry. F. Jensen. John Wiley and Sons \(1999\).](#)
-  Density Functional Methods in Chemistry and Material Science. M. Springborg (ed.) John Wiley and Sons (1997).



Quantum Chemistry, Ira N. Levine, 5 ed., Prentice-Hall, Inc. (2000)

## Bibliografía Complementaria



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



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).

## 11. Observaciones y recomendaciones

### 4.1 Competencias Básicas

- CB6. Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación. [Básica1]
- CB7. Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio. [Básica2]
- CB8. Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios. [Básica3]
- CB9. Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades. [Básica4]
- CB10. Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo. [Básica5]

### 4.2 Competencias de la titulación

- CBM-1. Sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.
- CBM-3. Sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades.



- 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-9. Habilidades interpersonales y de trabajo en equipo indispensables para llevar a cabo investigación dentro de un Grupo.
- CGM-10. Adquirir capacidad para relacionarse con personas especializadas en entornos científicos relacionados, indispensables para desarrollar innovaciones o investigaciones multidisciplinares de calidad.
- CGM-11. Adquirir la capacidad de comprender y asimilar el contenido de las publicaciones científicas relacionadas con los campos de investigación en Química Fina y Molecular.
- CGM-13. Ser capaces de aplicar los conocimientos y capacidades adquiridos para reconocer los retos actuales más importantes en Química Fina y Molecular.
- 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.

NECESIDADES EDUCATIVAS ESPECIALES. Aquellos estudiantes con discapacidad o necesidades educativas especiales podrán dirigirse al Servicio de Atención a la Diversidad y Voluntariado (ADYV; <http://www.um.es/advv/>) para recibir orientación sobre un mejor aprovechamiento de su proceso formativo y, en su caso, la adopción de medidas de equiparación y de mejora para la inclusión, en virtud de la Resolución Rectoral R-358/2016. El tratamiento de la información sobre este alumnado, en cumplimiento con la LOPD, es de estricta confidencialidad.