



## FICHA IDENTIFICATIVA

### DATOS DE LA ASIGNATURA

**Código:** 36463  
**Nombre:** Química Computacional  
**Ciclo:** Grado  
**Créditos ECTS:** 6  
**Curso académico:** 2025-26

### TITULACIONES

Titulación	Centro	Curso	Periodo
1110 - Grado en Química	Facultat de Química	4	Primer cuatrimestre

### MATERIAS

Titulación	Materia	Carácter
1110 - Grado en Química	Química Física Aplicada	OPTATIVA

### COORDINACIÓN

TUÑÓN GARCIA DE VICUÑA IGNACIO NILO

## RESUMEN

**DESCRIPTORES:** Modelos teóricos y simulación computacional. Mecánica molecular. Dinámica molecular. Química cuántica. Cálculo de propiedades. Aplicaciones.

Junto con la Teoría y el Experimento, la Simulación (modelización) es el tercer pilar del conocimiento científico. Desde la década de los 90, la evolución de la informática ha permitido la incorporación útil y efectiva de la modelización en el entorno Químico: La Química Computacional.

La Química Computacional es un área del conocimiento multidisciplinar. En ella convergen informática y documentación, la matemática (optimización, álgebra de operadores, cálculo, ecuaciones diferenciales, etc.) la física y química-física, la química cuántica, la bioquímica, las químicas orgánica, inorgánica y analítica e incluso la ingeniería. Se pretende, pues, dar una visión global de la Química desde la perspectiva de la modelización como eje vertebrador de todos los conocimientos adquiridos durante los estudios.

## CONOCIMIENTOS PREVIOS

### RELACIÓN CON OTRAS ASIGNATURAS DE LA MISMA TITULACIÓN

No se han especificado restricciones de matrícula con otras asignaturas del plan de estudios.

**OTROS TIPOS DE REQUISITOS**

Química General I y II, Matemáticas I y II, Aplicaciones Informáticas en Química, Química Física II y III, Química Inorgánica III, Bioquímica, Química Orgánica III.

Los impartidos en las asignaturas prerequisite, especialmente los adquiridos como fundamentos de matemáticas, estadística, optimización, mecánica cuántica y espectroscopia.

**COMPETENCIAS / RESULTADOS DE APRENDIZAJE**

-

Al final de la materia el estudiante/la estudiante demostrará capacidad de análisis, síntesis y razonamiento crítico.

Al final de la materia el estudiante/la estudiante demostrará capacidad inductiva y deductiva.

Al final de la materia el estudiante/la estudiante distinguirá los aspectos cualitativos y cuantitativos de los problemas químicos.

Al final de la materia el estudiante/la estudiante enumerará los principios de la Mecánica Cuántica y los aplicará a la descripción de la estructura y propiedades de átomos y moléculas.

Al final de la materia el estudiante/la estudiante evaluará, interpretará y sintetizará los datos e información Química de forma correcta

Al final de la materia el estudiante/la estudiante identificará la estructura y reactividad de las principales clases de biomoléculas y la química de los principales procesos biológicos.

Al final de la materia el estudiante/la estudiante identificará los procesos químicos en la vida diaria.

Al final de la materia el estudiante/la estudiante identificará los tipos principales de reacción química y sus principales características asociadas.

Al final de la materia el estudiante/la estudiante Interpretará los datos procedentes de observaciones y medidas en el laboratorio en términos de su significación y de las teorías que la sustentan

Al final de la materia el estudiante/la estudiante podrá describir las características y comportamiento de los diferentes estados de la materia y las teorías empleadas para explicarlos.

Al final de la materia el estudiante/la estudiante podrá implementar metodologías sostenibles y respetuosas con el medio ambiente.

Al final de la materia el estudiante/la estudiante relacionará la Química con otras disciplinas.

Al final de la materia el estudiante/la estudiante relacionará teoría y experimentación.

Al final de la materia el estudiante/la estudiante resolverá problemas de forma efectiva.

Al final de la materia el estudiante/la estudiante será capaz de aplicar la metrología de los procesos químicos incluyendo la gestión de calidad.



Al final de la materia el estudiante/la estudiante será capaz de evaluar los riesgos en el uso de sustancias químicas y procedimientos de laboratorio.

Al final de la materia el estudiante/la estudiante utilizará correctamente la terminología química, nomenclatura, convenios y unidades.

Colaborar eficazmente en equipos de trabajo, asumiendo responsabilidades y funciones de liderazgo y contribuyendo a la mejora y desarrollo colectivo.

Comprender la empresa como una realidad sistémica e inherentemente compleja, reconociendo e identificando las dimensiones consustanciales a los sistemas de gestión empresarial y los condicionantes, externos e internos, que inciden sobre su gestión.

Ser capaces de categorizar y jerarquizar las decisiones organizativas, e interpretar los procesos de adopción de decisiones en el ámbito de los modelos teóricos. Discriminar y manejar los principales métodos y técnicas disponibles para la elaboración del diagnóstico estratégico. Poder elaborar un diagnóstico estratégico básico.

Comprender las particularidades contables que presenta la regulación jurídico-mercantil de las empresas, relacionando la legislación mercantil aplicable a los distintos tipos operaciones societarias con la contabilidad de los hechos económicos que se regulan. Aprender a relacionar las leyes mercantiles que se ocupan de los concursos de acreedores con la contabilidad, adquiriendo práctica en el manejo de determinados textos legales vigentes.

Conocer y comprender, desde el propio ámbito de la titulación, las desigualdades por razón de sexo y género en la sociedad; integrar las diferentes necesidades y preferencias por razón de sexo y de género en el diseño de soluciones y resolución de problemas.

Contribuir en el diseño, desarrollo y ejecución de soluciones que den respuesta a demandas sociales, teniendo en cuenta como referente los Objetivos de Desarrollo Sostenible.

Demostrar razonamiento crítico y autocrítico en el ámbito de la titulación, considerando aspectos tales como la ética profesional, los valores morales y las implicaciones sociales de las diferentes actividades realizadas

Expresarse correctamente, tanto en forma oral como escrita, en cualquiera de las lenguas oficiales de la comunidad valenciana

Manejar la instrumentación química utilizada en las distintas áreas de la Química.

Saber comunicarse de manera efectiva, tanto de forma oral como escrita, adaptándose a las características de la situación y de la audiencia.

Ser capaces de analizar la influencia que sobre el diseño del sistema de información de costes, ejercen, tanto la actividad concreta desarrollada por la entidad como la tecnología utilizada, la estructura organizativa y el estilo de dirección. Calcular costes preestablecidos y relacionarlos con la planificación y el control de la actividad interna. Seleccionar aquellos indicadores de gestión que faciliten el desempeño personal, estableciendo la frecuencia y el formato en función del usuario de destino.

Ser capaces de configurar y manejar un sistema integrado para la gestión contable de la empresa. Utilizar la hoja de cálculo como herramienta de análisis de la información económica de la empresa. Saber aplicar



programas de apoyo a tareas específicas de gestión.

## DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS

### 1. Familiarización con el entorno de cálculo

4,5 horas de explicación y trabajo práctico

Química Computacional

El entorno de trabajo: Linux

Energía potencial molecular

Especificación geometría molecular: matriz-Z

El input de Gaussian

Gaussview & ChemOffice

### 2. Seminario sobre Hartree-Fock (I)

1 Sesión de seminario de 1,5 horas

Ecuaciones de Hartree-Fock (HF)

Hamiltoniano molecular

Funciones polielectrónicas y monolectrónicas.

Energía molecular: Integrales de core, de Coulomb y de intercambio

Reglas de Slater

Operadores de Coulomb y de Intercambio

Obtención de los spin-orbitales óptimos: Teorema de Brillouin

Operador de Fock: Ecuaciones de HF

Ecuaciones canónicas de HF

### 3. Seminario sobre Hartree-Fock (II)

1 Sesión de seminario de 1,5 horas

Sentido físico de las soluciones de las ecuaciones de HF

Integrales de core, de Coulomb y de intercambio

Orbitales ocupados y virtuales

Energía de los orbitales y energía molecular

Teorema de Koopmans

1 Sesión de seminario de 1,5 horas



#### 4. Seminario sobre Hartree-Fock (III)

1 Sesión de seminario de 1,5 horas

HF restringido para sistemas en capa cerrada: Ecuaciones de Roothaan

HF en capa cerrada: Spin-Orbitales restringidos

Introducción de una base: Ecuaciones de Roothaan

La densidad de carga

Expresión de la matriz de Fock

Ortogonalización de la base

Procedimiento SCF

Valores esperados y análisis de población

#### 5. Seminario sobre Hartree-Fock (IV)

1 Sesión de seminario de 1,5 horas

HF no restringido para sistemas en capa abierta: Ecuaciones de Pople-Nesbet

HF en capa abierta: Spin-Orbitales no restringidos

Introducción de una base: Ecuaciones de Pople-Nesbet

Matrices de densidad no restringidas

Expresión de las matrices de Fock

Solución de las ecuaciones SCF no restringidas

El problema de la disociación y su solución no restringida: la molécula H<sub>2</sub> como ejemplo

#### 6. Seminario sobre optimización de geometrías moleculares

1 Sesión de seminario de 1,5 horas

Optimización Molecular

Estructuras de mínima energía

Optimizando una función: métodos

Estructuras estacionarias

#### 7. Seminario sobre la teoría del funcional de la densidad

1 Sesión de seminario de 1,5 horas

Teoría del funcional de la densidad

Los principios básicos de la teoría del funcional de la densidad (DFT)

La aproximación de Kohn-Sham

Aplicaciones de la DFT

Fortalezas y debilidades de la DFT



## 8. Fundamentos de Reactividad

1 Sesión de seminario de 1,5 horas

Reactividad química

Superficie de Energía Potencia

Estructuras estacionarias

Camino de mínima energía

Teoría del estado de Transición

## 9. Métodos semiempíricos

1 Sesión de seminario de 1 hora

Métodos semiempíricos de la teoría de orbitales moleculares

Aproximación de las integrales Hartree-Fock

Clasificación Hückel Extendido, Solapamiento Diferencial Nulo (ZDO) y Omisión del Solapamiento Diferencial Diatómico (NDDO)

Teoría y uso de las parametrizaciones Modelo Austin (AM1) y Modelos Paramétricos número 3 (PM3) y número 6 (PM6)

## 10. Métodos post HF (I)

1 Sesión de seminario de 1,5 horas

La correlación electrónica

Correlación electrónica

Propiedades formales de los métodos:

o Extensividad

o Consistencia con el tamaño

o N-dependencia

El papel de las configuraciones doble y simplemente excitadas en la función de onda

Teoría de perturbaciones Rayleigh-Schrodinger

Teoría de perturbaciones de muchos cuerpos (MBPT)

## 11. Métodos post HF (II)

1 Sesión de seminario de 1,5 horas

Métodos de cálculo de la correlación electrónica

Métodos Moller-Plesset MP2 y MP4

Grado de excitación y orden de perturbación

Interacción de configuraciones. El problema de la falta de consistencia con el tamaño

Teoría de Coupled Cluster



## 12. Mecánica Molecular y modelos de continuo

1 Sesión de seminario de 1,5 horas

Mecánica Molecular

Justificación de la mecánica molecular (MM)

Términos energéticos

Parametrización de un campo de fuerza y ejemplos

Modelos de continuo: términos energéticos y cálculo

## 13. Dinámica Molecular

1 Sesión de seminario de 1,5 horas

Dinámica Molecular

Justificación de los métodos de simulación

Definición del sistema: condiciones de contorno

Dinámica Molecular

## 14. Energía y estructura electrónica

Trabajo práctico de aula de informática de 4,5 horas

Energías de ionización y afinidades electrónicas de átomos

Curvas de disociación: HCl y HH

Visualización de la densidad electrónica y orbitales moleculares

Conceptos: cálculo HF y funciones de base

## 15. Optimización de estructuras moleculares

Trabajo práctico de aula de informática de 6 horas

Optimización de una función: métodos

Estructuras estacionarias. Clasificación

Optimización de estructuras HF. Efecto de la base

Métodos de Funcional de la Densidad

Optimización con métodos DFT

Curvas de Energía potencial

Estructuras estacionarias

Trabajo práctico de aula de informática de 3 horas



## 16. Reactividad química

Trabajo práctico de aula de informática de 3 horas

Superficie de Energía Potencial (SEP)

Estado de Transición

Camino de mínima energía

Teoría del Estado de Transición

Cálculo de la SEP de la reacción química  $F^- + CH_3Cl$

Cálculo de la constante de velocidad

Localización directa de estados de transición

## 17. Cálculos semiempíricos

Trabajo práctico de aula de informática de 2 horas

Métodos semiempíricos vs Hartree-Fock/post-Hartree-Fock

Comparación de geometrías y estabilidad de moléculas de tamaño creciente

Conceptos: criterios de precisión de métodos de química cuántica

## 18. Cálculos espectroscópicos

Trabajo práctico de aula de informática de 3 horas

Espectroscopia rotacional, vibracional y electrónica.

Modos normales.

Termoquímica

Conceptos: transiciones entre niveles energéticos. Funciones de partición, propiedades termodinámicas

## 19. Efectos del disolvente sobre procesos químicos

Trabajo práctico de aula de informática de 4,5 horas

Modelos discreto y continuo

Efecto del disolvente sobre el equilibrio tautomérico

Efecto del disolvente sobre el equilibrio conformacional

Efecto del disolvente sobre la reactividad química

Conceptos: interacciones intermoleculares

Trabajo práctico de aula de informática de 4,5 horas

Introducción a la descripción de grandes sistemas

Campos de fuerza. El caso del agua



## 20. Cálculos de Dinámica Molecular

Trabajo práctico de aula de informática de 4,5 horas

Introducción a la descripción de grandes sistemas Dinámica Molecular del agua líquida. Función de distribución radial y número de coordinación  
DM de disoluciones acuosas. Coeficiente de difusión  
DM de biomoléculas. Plegamiento de proteínas  
Conceptos: espacio configuracional

## 21. Aplicaciones

2 sesiones de aula de informática de 2 horas cada una

Desarrollo de dos pequeños proyectos en los que los estudiantes aplican los conceptos y los métodos que se han explicado en los contenidos del curso en su conjunto.

## VOLUMEN DE TRABAJO (HORAS)

### ACTIVIDADES PRESENCIALES

Actividad	Horas
Tutorías	12,00
Aula informática	48,00
<b>Total horas</b>	<b>60,00</b>

### ACTIVIDADES NO PRESENCIALES

Actividad	Horas
Asistencia a otras actividades	0,00
Elaboración de trabajos individuales o en grupo	20,00
Estudio y trabajo autónomo	35,00
Preparación de clases	25,00
Preparación de actividades de evaluación	10,00
Resolución de casos prácticos	0,00
<b>Total horas</b>	<b>90,00</b>

## METODOLOGÍA DOCENTE

**Sesiones prácticas en aula de informática:** Comprenden 7 sesiones prácticas de entre 3 y 6 horas. Consisten en una primera parte en la que el profesor explica de forma resumida los fundamentos y las técnicas necesarias para la ejecución de la práctica. En una segunda parte se lleva a término el desarrollo de la práctica usando los paquetes informáticos adecuados. Corresponden a las unidades temáticas desde la UT14 a la UT20.



Está previsto que el trabajo práctico de cada sesión se tenga que finalizar de forma autónoma por parte del alumno. La conclusión de la práctica consiste en acabar los cálculos y en la redacción de un breve informe de los resultados que se tiene que entregar en el plazo máximo de una semana. La dedicación media por parte del alumno es de aproximadamente 2 horas de trabajo autónomo, por sesión.

Con el objetivo de que el alumno pueda disponer, para su trabajo autónomo, de exactamente el mismo conjunto de programas que se usa en el aula de ordenadores, las prácticas se realizarán utilizando un disco virtual que contiene el sistema operativo y todos los programas de cálculo necesarios en la asignatura y del que los alumnos dispondrán de una copia.

**Seminarios:** Consisten en 13 sesiones de 1 ó 1,5 horas, en forma de seminario, donde se expondrán los conceptos fundamentales de la Química Computacional, haciendo hincapié en los aspectos más importantes para la aplicación de los métodos de cálculo. Corresponden a las unidades temáticas UT1 a UT13.

**Trabajos prácticos personalizados:** En las dos últimas sesiones prácticas en aula de informática, los estudiantes tendrán que desarrollar un pequeño proyecto de cálculo utilizando el conjunto de los conceptos y métodos del curso. Está previsto que el trabajo práctico de cada sesión se tenga que acabar de forma autónoma por parte del alumno utilizando alrededor de 4 horas, el resto de trabajo autónomo. La conclusión de los proyectos consiste en acabar los cálculos y en la redacción de un informe que se defenderá oralmente. Corresponden a la unidad temática UT21.

## EVALUACIÓN

Para la evaluación de la asignatura Química computacional se valorarán:

- Examen final: prueba consistente en la realización de un proyecto: Se presentará un informe escrito y se defenderá oralmente (60%)
- Evaluación de la participación en las exposiciones orales (10%)
- Evaluación de informes y memorias correspondientes a las sesiones prácticas (20%)

Evaluación continua de cada alumno, basada en la asistencia regular a las clases y actividades presenciales, participación y grado de implicación en el proceso de enseñanza-aprendizaje (10%).

### Advertencia final

La copia o plagio manifiesto de cualquier tarea que forma parte de la evaluación supondrá la imposibilidad de superar la asignatura, sometiéndose seguidamente a los procedimientos disciplinarios oportunos.

Téngase en cuenta que, de acuerdo con el artículo 13 d) del Estatuto del Estudiante Universitario (RD 1791/2010, de 30 de diciembre), *'es deber de un estudiante abstenerse en la utilización o cooperación en procedimientos fraudulentos en las pruebas de evaluación, en los trabajos que se realicen o en documentos oficiales de la Universidad'*.



## BIBLIOGRAFÍA

- CRAMER, C.J. Essentials of Computational Chemistry. Theories and Models. Wiley, 2004.
- LEWARS, E.G. Computational Chemistry. Introduction to Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics. 2ª Ed. Springer, 2011
- JENSEN, F. Introduction to Computational Chemistry. Wiley, 1999.
- BERTRÁN RUSCA, J., BRACHANDELL GALLO, V., MORENO FERRER, M., SODUPE FERRER, M. Química Cuántica: fundamentos y aplicaciones computacionales. Síntesis. Madrid, 2000
- LEVINE, I.N. Química Cuántica. 5a ed. Prentice Hall, 2001.
- SZABO, A., OSTLUND, N.S. Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory. Dover, 1996