

**FITXA IDENTIFICATIVA****DADES DE L'ASSIGNATURA**

Codi: 36463
Nom: Química Computacional
Cicle: Grau
Crèdits ECTS: 6
Curs acadèmic: 2025-26

TITULACIONS

Titulació	Centre	Curs	Període
1110 - Grau de Química	Facultat de Química	4	Primer quadrimestre

MATÈRIES

Titulació	Matèria	Caràcter
1110 - Grau de Química	Química Física Aplicada	OPTATIVA

COORDINACIÓ

TUÑÓN GARCIA DE VICUÑA IGNACIO NILO

RESUM

DESCRIPTORS: Models teòrics i simulació computacional. Mecànica molecular. Dinàmica molecular. Química quàntica. Càlcul de propietats. Aplicacions.

Juntament amb la Teoria i l'Experiment, la Simulació (modelització) és el tercer pilar del coneixement científic. Des de la dècada dels 90, l'evolució de la informàtica ha permès la incorporació útil i efectiva de la modelització en l'entorn Químic: La Química Computacional.

La Química Computacional és un àrea del coneixement multidisciplinària. En ella convergeixen informàtica i documentació, la matemàtica (optimització, àlgebra d'operadors, càlcul, equacions diferencials, etc.) la física i química-física, la química quàntica, la bioquímica, les químiques orgànica, inorgànica i analítica i fins i tot l'enginyeria. Es pretén, doncs, donar una visió global de la Química des de la perspectiva de la modelització com eix vertebrador de tots els coneixements adquirits durant els estudis.

CONEIXEMENTS PREVIS**RELACIÓ AMB ALTRES ASSIGNATURES DE LA MATEIXA TITULACIÓ**

No s'ha especificat restriccions de matrícula amb altres assignatures del pla d'estudis.

**ALTRES TIPUS DE REQUISITS**

Química General I i II, Matemàtiques I i II, Aplicacions Informàtiques en Química, Química Física II i III, Química Inorgànica III, Bioquímica, Química Orgànica III.

Els impartits en les assignatures prè-requisit, especialment els adquirits com fonaments de matemàtiques, estadística, optimització, mecànica quàntica i espectroscòpia.

COMPETÈNCIES / RESULTATS D' APRENTATGE

-

Al final de la matèria l'estudiant/l'estudianta sabrà distingir els aspectes qualitius i quantitius dels problemes químics.

Al final de la matèria l'estudiant/l'estudianta sabrà identificar l'estructura i reactivitat de les principals classes de biomolècules i la química dels principals processos biològics.

Al final de la matèria l'estudiant/l'estudianta serà capaç d'aplicar la metrologia dels processos químics, incloent la gestió de qualitat.

Al final de la matèria l'estudiant/l'estudiant avaluàrà, interpretarà i sintetitzarà les dades i informació Química de manera correcta

Al final de la matèria l'estudiant/l'estudiant demostrarà capacitat inductiva i deductiva.

Al final de la matèria l'estudiant/l'estudiant Interpretarà les dades procedents d'observacions i mesures en el laboratori en termes de la seua significació i de les teories que la sustenten

Al final de la matèria l'estudiant/l'estudiant podrà descriure les característiques i comportament dels diferents estats de la matèria i les teories emprades per a explicar-los.

Al final de la matèria l'estudiant/l'estudiant podrà identificar els tipus principals de reacció química i les seues principals característiques associades.

Al final de la matèria l'estudiant/l'estudiant podrà implementar metodologies sostenibles i respectuoses amb el medi ambient.

Al final de la matèria l'estudiant/l'estudiant podrà resoldre problemes de manera efectiva.

Al final de la matèria l'estudiant/l'estudiant sabrà demostrar capacitat d'anàlisi, síntesi i raonament crític.

Al final de la matèria l'estudiant/l'estudiant sabrà enumerar els principis de la mecànica quàntica i els sabrà aplicar a la descripció de l'estructura i les propietats d'àtoms i molècules.

Al final de la matèria l'estudiant/l'estudiant sabrà identificar els processos químics en la vida diària.

Al final de la matèria l'estudiant/l'estudiant sabrà relacionar la química amb altres disciplines.

Al final de la matèria l'estudiant/l'estudiant sabrà relacionar teoria i experimentació.



Al final de la matèria l'estudiant/l'estudiant sabrà usar correctament la terminologia química, nomenclatura, convenis i unitats.

Al final de la matèria l'estudiant/l'estudiant serà capaç d'avaluar els riscos en l'ús de substàncies químiques i procediments de laboratori.

Col·laborar eficaçment en equips de treball, assumint responsabilitats i funcions de lideratge i contribuint a la millora i desenvolupament col·lectiu.

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.

Comprendre les particularitats comptables que presenta la regulació juridicomercantil de les empreses, relacionant la legislació mercantil aplicable als distints tipus operacions societàries amb la comptabilitat dels fets econòmics que es regulen. Aprendre a relacionar les lleis mercantils que s'ocupen dels concursos de creditors amb la comptabilitat, adquirint pràctica en el maneig de determinats textos legals vigents.

Conèixer i comprendre, des del mateix àmbit de la titulació, les desigualtats per raó de sexe i gènere en la societat; integrar les diferents necessitats i preferències per raó de sexe i de gènere en el disseny de solucions i resolució de problemes.

Contribuir en el disseny, desenvolupament i execució de solucions que donen resposta a demandes socials, tenint en compte com a referent els Objectius de Desenvolupament Sostenible.

Demostrar raonament crític i autocrític en l'àmbit de la titulació, considerant aspectes com ara l'ètica professional, els valors morals i les implicacions socials de les diferents activitats realitzades.

Expressar-se correctament, tant de manera oral com escrita, en qualsevol de les llengües oficials de la Comunitat Valenciana.

Manejar la instrumentació química utilitzada en les diferents àrees de la Química.

Saber comunicar-se de manera efectiva, tant de manera oral com escrita, adaptant-se a les característiques de la situació i de l'audiència.

Ser capaces d'analitzar la influència que sobre el disseny del sistema d'informació de costos, exercixen, tant l'activitat concreta desenrotllada per l'entitat com la tecnologia utilitzada, l'estructura organitzativa i l'estil de direcció. Calcular costos preestablits i relacionar-los amb la planificació i el control de l'activitat interna. Seleccionar aquells indicadors de gestió que faciliten l'exercici personal, establint la freqüència i el format en funció de l'usuari de destí.

Ser capaces de configurar i manejar un sistema integrat per a la gestió comptable de l'empresa. Utilitzar el full de càlcul com a ferramenta d'anàlisi de la informació econòmica de l'empresa. Saber aplicar programes de suport a tasques específiques de gestió.



DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

1. Familiarització amb l'entorn de càlcul

4,5 hores d'explicació i treball pràctic

Química Computacional

Entorn de treball: Linux

Energia potencial molecular

Especificació de la geometria molecular: matriu-Z

Input de Gaussian

Gaussview & ChemOffice

2. Seminari sobre Hartree-Fock (I)

1 Sessió de seminari de 1,5 hores

Equacions de Hartree-Fock (HF)

Hamiltoniana molecular

Funcions polieletròniques i monoelèctriques.

Energia molecular: Integrals de core, de Coulomb i d'intercanvi

Regles de Slater

Operadors de Coulomb y d'intercanvi

Obtenció dels spin-orbitals òptims: Teorema de Brillouin

Operador de Fock: Equacions de HF

Equacions canòniques de HF

3. Seminari sobre Hartree-Fock (II)

1 Sessió de seminari de 1,5 hores

Sentit físic de les solucions de les equacions de HF

Integrals de core, de Coulomb i d'intercanvi

Orbitals ocupats i virtuals

Energia dels orbitals i energia molecular

Teorema de Koopmans

1 Sessió de seminari de 1,5 hores

HF restringit per sistemes en capa tancada: Equacions de Roothaan

HF en capa tancada: Spin-Orbitals restringits



4. Seminari sobre Hartree-Fock (III)

1 Sessió de seminari de 1,5 hores

HF restringit per sistemes en capa tancada: Equacions de Roothaan Introducció duna base: Equacions de Roothaan

La densitat de càrrega

Expressió de la matriu de Fock

Ortogonalització de la base

Procediment SCF

Valors esperats i anàlisi de població

5. Seminari sobre Hartree-Fock (IV)

1 Sessió de seminari de 1,5 hores

HF no restringit per sistemes en capa oberta: Equacions de Pople-Nesbet

HF en capa oberta: Spin-Orbitals no restringits

Introducció duna base: Equacions de Pople-Nesbet

Matrius de densitat no restringides

Expressió de les matrius de Fock

Solució de les equacions SCF no restringides

El problema de la dissociació i la seua solució no restringida: la molècula H₂ com exemple

6. Seminari sobre optimització de geometries moleculars

1 Sessió de seminari de 1,5 hores

Optimització Molecular

Estructures de mínima energia

Optimitzant una funció: mètodes

Estructures estacionàries

7. Seminari sobre la teoria del funcional de la densitat

1 Sessió de seminari de 1,5 hores

Teoria del funcional de la densitat

Els principis bàsics de la teoria del funcional de la densitat (DFT)

Laproximació de Kohn-Sham

Aplicacions de la DFT

Fortaleses i febleses de la DFT



8. Fonaments de Reactivitat

1 Sessió de seminari de 1,5 hores

Reactivitat química

Superfície d'Energia Potencial

Estructures estacionàries

Camí de mínima energia

Teoria de l'estat de Transició

9. Mètodes semiempírics

1 Sessió de seminari de 1 hora

Mètodes semiempírics de la teoria d'orbitals moleculars

Aproximació de les integrals Hartree-Fock

Classificació Hückel Extés, Solapament Diferencial Nul (ZDO) y Omissió del Solapament Diferencial Diatòmic (NDDO)

Teoria i ús de les parametritzacions Model Austin (AM1) y Models Paramètrics nombre 3 (PM3) i nombre 6 (PM6)

10. Mètodes post HF (I)

1 Sessió de seminari de 1,5 hores

La correlació electrònica

Correlació electrònica

Propietats formals dels mètodes:

o Extensivitat

o Consistència amb la grandària

o N-dependència

El paper de les configuracions doble i simplement excitades en la funció dona

Teoria de perturbacions Rayleigh-Schrodinger

Teoria de perturbacions de molts cossos (MBPT)

11. Mètodes post HF (II)

1 Sessió de seminari de 1,5 hores

Mètodes de càlcul de la correlació electrònica

Mètodes Moller-Plesset MP2 i MP4

Grau d'excitació i ordre de perturbació

Interacció de configuracions. El problema de la manca de consistència amb la grandària

Teoria de Coupled Cluster



12. Mecànica Molecular i models de continu

1 Sessió de seminari de 1,5 hores

Mecànica Molecular

Justificació de la mecànica molecular (MM)

Termes energètics

Parametrització dun camp de força i exemples

Models de Continu: termes energètics i càlcul

13. Dinàmica Molecular

1 Sessió de seminari de 1,5 hores

Dinàmica Molecular

Justificació dels mètodes de simulació

Definició del sistema: condicions de contorn

Dinàmica Molecular

14. Energia i estructura electrònica

Treball pràctic dAula dInformàtica de 4,5 hores

Energies dionització i afinitats electròniques d'àtoms

Corbes de dissociació: HCl i HH

Visualització de la densitat electrònica i orbitals moleculars

Conceptes: càlcul HF i funcions de base

15. Optimització de structures moleculars

Treball pràctic dAula dInformàtica de 6 hores

Optimització duna funció: mètodes

Estructures estacionàries. Classificació

Optimització de structures HF. Efecte de la base

Mètodes de Funcional de la Densitat

Optimització amb mètodes DFT

Corbes dEnergia potencial

Estructures estacionàries

Treball pràctic dAula dInformàtica de 4,5 hores



16. Reactivitat química

Treball pràctic d'Aula d'Informàtica de 4,5 hores
Superfície d'Energia Potencial (SEP)
Estat de Transició
Camí de mínima energia
Teoria de l'Estat de Transició
Càlcul de la SEP de la reacció química $F^- + CH_3Cl$
Càlcul de la constant de velocitat
Localització directa de l'estat de transició

17. Càlculs semiempírics

Treball pràctic d'Aula d'Informàtica de 2 hores

Mètodes semiempírics vs Hartree-Fock/post-Hartree-Fock
Comparació de geometries i estabilitat de molècules de mida creixent
Conceptes: criteris de precisió de mètodes de química quàntica

18. Càlculs espectroscòpics

Treball pràctic d'Aula d'Informàtica de 3 hores

Espectroscòpia rotacional, vibracional i electrònica
Modes normals
Termoquímica
Conceptes: transicions entre nivells energètics. Funcions de partició, propietats termodinàmiques

19. Efectes del dissolvent sobre processos químics

Treball pràctic d'Aula d'Informàtica de 4,5 hores

Models discret i continu
Efecte del dissolvent sobre l'equilibri tautomèric
Efecte del dissolvent sobre l'equilibri conformacional
Efecte del dissolvent sobre la reactivitat química
Conceptes: interaccions intermoleculares

Treball pràctic d'Aula d'Informàtica de 4,5 hores

Introducció a la descripció de grans sistemes
Camps de força. El cas de laigua



20. Càlculs de Dinàmica Molecular

Treball pràctic d'Aula d'Informàtica de 4,5 hores

Introducció a la descripció de grans sistemes Dinàmica Molecular de laigua líquida. Funció de distribució radial i número de coordinació

DM de dissolucions aquoses. Coeficient de difusió

DM de biomolècules. Plegament de proteïnes

Conceptes: espai configuracional

21. Aplicacions

2 Sessions d'Aula d'Informàtica de 2 hores cada una

Desenvolupament de dos xicotets projectes on els estudiants apliquen els conceptes i els mètodes que shan explicat en els continguts del curs en el seu conjunt

VOLUM DE TREBALL (HORES)

ACTIVITATS PRESENCIALS

Activitat	Hores
Tutories	12,00
Aula informàtica	48,00
Total hores	60,00

ACTIVITATS NO PRESENCIALS

Activitat	Hores
Assistència a altres activitats	0,00
Elaboració de treballs individuals o en grup	20,00
Estudi i treball autònom	35,00
Preparació de classes	25,00
Preparació d'activitats d'avaluació	10,00
Resolució de casos pràctics	0,00
Total hores	90,00

METODOLOGIA DOCENT

Sessions pràctiques en aula d'informàtica: Comprenen 7 sessions pràctiques d'entre 3 i 6 hores. Consisteixen en una primera part en la qual el professor explica de forma resumida els fonaments i les tècniques necessàries per a l'execució de la pràctica. En una segona part es duu a terme el desenvolupament de la pràctica usant els paquets informàtics adequats. Corresponen a les unitats temàtiques des de la UT14 a la UT20.



Està previst que el treball pràctic de cada sessió s'haja d'acabar de forma autònoma per part de l'alumne. La conclusió de la pràctica consisteix a acabar els càlculs i en la redacció d'un breu informe dels resultats que s'ha de lliurar en el termini màxim d'una setmana. La dedicació mitjana per part de l'alumne és de aproximadament 2 hores de treball autònom, per sessió.

Amb l'objectiu que l'alumne puga disposar, per al seu treball autònom, d'exactament el mateix conjunt de programes que s'usa a l'aula d'ordinadors, les pràctiques es duran a terme utilitzant un disc virtual que conté el sistema operatiu i tots els programes de càlcul necessaris en l'assignatura i del qual els alumnes en disposaran d'una còpia.

Seminaris: Consisteixen en 13 sessions de 1 ó 1,5 hores, en forma de seminari, on s'exposaran els conceptes fonamentals de la Química Computacional, fent relleu dels aspectes més importants per a l'aplicació dels mètodes de càlcul. Corresponen a les unitats temàtiques UT1 a UT13.

Treballs pràctics personalitzats: En les dues darreres sessions pràctiques en aula d'informàtica, els estudiants hauran de desenvolupar un xicotet projecte de càlcul utilitzant el conjunt dels conceptes i mètodes del curs. Està previst que el treball pràctic de cada sessió s'haja d'acabar de forma autònoma per part de l'alumne emprant al voltant de 4 hores, la resta de treball autònom. La conclusió dels projectes consisteix a acabar els càlculs i en la redacció d'un informe dels resultats que s'ha de defensar oralment. Corresponen a la unitat temàtica UT21.

AVALUACIÓ

Per a l'avaluació de l'assignatura Química computacional es valoraran:

- Examen final: prova consistent en la realització d'un projecte. Es presentarà un informe escrit i es defensarà oralment (60%)
- Avaluació de la participació en les exposicions orals (10%)
- Avaluació d'informes, memòries corresponents a les sessions pràctiques (20%)

Avaluació contínua de cada alumne, basada en l'assistència regular a les classes i activitats presencials, participació i grau d'implicació en el procés d'ensenyament-aprenentatge (10%)

Advertiment final

La còpia o plagi manifest de qualsevol tasca que forma part de l'avaluació suposarà la impossibilitat de superar l'assignatura.

Cal tindre en compte que, d'acord amb l'article 13 d) de l'Estatut de l'Estudiant Universitari (RD 1791/2010, de 30 de desembre), 'és deure d'un estudiant abstindre's en la utilització o cooperació en procediments fraudulents en les proves d'avaluació, en els treballs que es realitzen o en documents oficials de la Universitat'.



BIBLIOGRAFIA

- 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