

# QUÍMICA COMPUTACIONAL

**Carga lectiva:** 5 créditos  
**Profesores:** Pedro A. Enríquez (1 crédito)  
Francisco Corzana (1 crédito)  
Miguel González Pérez (1,5 créditos)  
José I. García Laureiro (1,5 créditos)

## Objetivos docentes.

El desarrollo de ordenadores de gran potencia de cálculo y bajo coste, de las técnicas de visualización por ordenador y de programas informáticos con interfaces de usuario sencillas ha facilitado que el uso de herramientas computacionales no se limite al químico especializado y sea una herramienta habitual para el químico experimental.

En este curso se profundiza en tres metodologías utilizadas en Química Computacional para la predicción de geometrías y propiedades moleculares, el análisis de mecanismos de reacción, el diseño molecular y el estudio de biomoléculas: Química Cuántica (QC), mecánica molecular (MM), dinámica molecular (DM) y métodos híbridos (QM/MM). En concreto, se pretende que los alumnos:

- Conozcan el fundamento teórico de los métodos más importantes de la QC, MM, DM y su ámbito de aplicación.
- Conozcan los programas de uso más habitual en la QC, MM y DM y cómo utilizarlos para resolver problemas prácticos.
- Iniciar al alumno en las técnicas de diseño molecular. Dotarle de los conocimientos básicos de informática que necesita para utilizar las técnicas de QC, MM, DM en la práctica y que son peculiares de este campo.
- Iniciar al alumno en las técnicas computacionales (QM/MM) para el estudio de reacciones enzimáticas.
- Comprender textos y publicaciones científicas, dentro del ámbito de su investigación, que utilicen técnicas de Química Computacional.

## Contenidos.

### Parte I. Química Cuántica.

La aproximación de Born-Oppenheimer. Concepto de superficies de energía potencial (SEP) y puntos estacionarios de un SEP. Procesos no-adiabáticos. Métodos HF y semiempíricos. Métodos de perturbaciones. Métodos multiconfiguracionales. Métodos DFT. Métodos para incluir el efecto del disolvente.

### Parte II. Mecánica Molecular, Dinámica Molecular y métodos híbridos.

Mecánica Molecular. Campos de fuerza. Parametrización de cargas. Algoritmos de minimización. Dinámica molecular. Algoritmos de integración. Simulación en fase gas y con disolvente. Utilización de condiciones periódicas. Tratamientos de interacciones electrostáticas. Métodos de control de presión y temperatura. Métodos híbridos QM/MM.

### Parte III. Aplicaciones.

Caracterización de SEP: determinación de geometrías moleculares, estados de transición y caminos de reacción. Espectroscopía RMN, IR, UV/VIS. Determinación de parámetros termodinámicos y constantes cinéticas. Cálculo de índices de reactividad. Aplicación de modelos de solvatación a resolución de problemas de reactividad. Estudios conformacionales de sistemas de interés biológico (carbohidratos, péptidos, proteínas) en disolución acuosa. Análisis conformacional de péptidos mediante la combinación de técnicas de dinámica molecular y datos experimentales de RMN. Métodos para el estudio de mecanismos de reacciones enzimáticas de interés biológico.

## Metodología utilizada para la enseñanza-aprendizaje.

El curso de Química Computacional tiene una dedicación docente de 5 créditos. El curso abarca esencialmente dos partes correspondientes a contenidos de Química Cuántica (métodos ab-initio, semiempíricos y DFT) y Mecánica y Dinámica Molecular, respectivamente. La dedicación a cada una de las partes es de un 50% del total de la asignatura. El método docente seleccionado para la impartición de esta asignatura consiste en sesiones de exposición de los contenidos teóricos, combinadas con sesiones prácticas de ordenador en las que se realizan ejercicios con el fin de comprender los conceptos presentados. En estas sesiones prácticas se utilizan programas de conexión con ordenadores remotos (SSH, XWindows) en los que están instaladas las aplicaciones de cálculo químico cuántico (Gaussian03) y de dinámica molecular (AMBER, GROMACS). En algunos casos, los resultados obtenidos se analizan en aula informática utilizando programas de visualización como GaussView, VMD, etc. Para facilitar el proceso de enseñanza-aprendizaje, se ha evitado establecer una dedicación determinada a los créditos prácticos de aula informática ya que depende en parte de la formación inicial de los alumnos matriculados en el curso. No obstante la dedicación a créditos de aula informática es aproximadamente de un 40% del total del curso. Por otra parte, el alumno tiene libre acceso a los recursos informáticos durante todo el curso de forma que pueda trabajar de forma autónoma.

## Evaluación.

La evaluación de los alumnos por parte del profesorado se basa en la asistencia y actitud (interés y participación) en clase y en el laboratorio computacional por parte de los alumnos, y en la evaluación de los ejercicios/ trabajos propuestos durante el curso.

## Bibliografía básica

- [1] Joan Bertran Rusca, Vicenç Branchadell Gallo, Miquel Moreno Ferrer, Mariona Sodupe Roure, Química cuántica: fundamentos y aplicaciones computacionales, Síntesis, Madrid, 2000
- [2] Ira N. Levine, Química Cuántica, Pearson Educacion, Madrid, 2001.
- [3] James B. Foresman and Aeleen Frisch, Exploring Chemistry With Electronic Structure Methods: A Guide to Using Gaussian , Gaussian, 1996. [4] Juan Andrés, Juan Beltrán [eds], Química Teórica y Computacional, Castellón de La Plana, Universidad Jaime I, 2000.
- [5] Alan Hinchliffe, Molecular Modelling for Beginners, Wiley, 2003
- [6] W. J. Hehre, Molecular Modeling Workbook, Wavefunction Inc., 2005.
- [7] W. J. Hehre, A guide to molecular mechanics and quantum chemical calculations, Wavefunction Inc., 2005.
- [8] J. Simons, An Experimental Chemist Guide to ab-initio Quantum Chemistry, J. Physical Chemistry, 95, 1017-1029 (1999)
- [9] D. C. Young, Computational Chemistry. A Practical Guide for Applying Techniques to Real-World Problems, Wiley, 2001
- [10] E. G. Lewars, Computational Chemistry: Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics, Springer, 2004.
- [11] A.R. Leach, Molecular modeling: Principles and applications. Prentice-Hall, 2001.

## Bibliografía avanzada.

- [12] Warren J. Hehre, Leo Radom, P. V. Schleyer, and John Pople, Ab initio molecular orbital theory, Wiley, 1998
- [13] A. Szabo and N. S. Ostlund, Modern Quantum Chemistry, Dover, 1996.
- [14] D. R. Yarkony, (ed), Modern Electronic Structure Theory, World Scientific, 1995
- [15] Katsunosuke Machida , Principles of Molecular Mechanics, Wiley-Kodansha, 2001.
- [16] J. M. Haile, Molecular Dynamics Simulation: Elementary Methods, Wiley, 2001
- [17] D. C. Rapaport, The Art of Molecular Dynamics Simulation, Cambridge University Press (2004)
- [18] D. Frankel and B. Smit, Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications, Academic Press, (1996)
- [19] A. K. Rappe and C. J. Casewt, Molecular Mechanics Across Chemistry, University Science Books, 1997.

