

Química Computacional
GUÍA DOCENTE
 Curso 2010-2011

Titulación:	Máster en Química Avanzada	Código
Asignatura:	Química Computacional	Código
Materia:	Química Computacional	
Módulo:		
Semestre:	1º	
Créditos ECTS:	5	Horas presenciales: 50 Horas de trabajo autónomo estimadas: 75
Idiomas en los que se imparte:	Castellano	
Idiomas del material de lectura o audiovisual:	Castellano e inglés	

Departamentos responsables de la docencia:

Química	Código
Dirección:	Edificio CCT. Calle Madre de Dios, 51
Teléfono:	941 299620
Fax:	941 29621
Correo electrónico:	dpto.quimicas@unirioja.es
Código postal:	26006

Profesores

Profesor responsable de la asignatura:	Pedro Alberto Enríquez Palma		
Teléfono:	941 299 638	Correo electrónico:	pedro.enriquez@unirioja.es
Despacho:	1202	Edificio:	Científico Tecnológico
Horario de tutorías:	Lunes, martes de 16 a 18h y jueves 12-14h		
Nombre profesor:	Francisco Corzana López		
Teléfono:	941 299 632	Correo electrónico:	francisco.corzana@unirioja.es
Despacho:	1116	Edificio:	Científico Tecnológico
Horario de tutorías:	lunes, viernes 9-12h		
Nombre profesor:	Diego Sampedro Ruiz		
Teléfono:	941 299647	Correo electrónico:	diego.sampedro@unirioja.es
Despacho:	1211	Edificio:	CCT
Horario de tutorías:	Lunes, martes y miércoles de 17 a 19h		

Nombre profesor:	Miguel González Pérez (Universidad de Barcelona)		
Teléfono:		Correo electrónico:	miguel.gonzalez@ub.edu
Despacho:		Edificio:	
Horario de tutorías:			

Descripción de contenidos:

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).

Requisitos previos:

No hay

PROGRAMA GENERAL

Contexto:

La Química Computacional juega un papel de primer orden en el desarrollo de la Química Moderna. 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.

Si bien en muchos casos, los resultados derivados de las simulaciones complementan la información obtenida en experimentos químicos, en otros, es posible predecir fenómenos químicos no observados hasta la fecha. Además, la Química Computacional es imprescindible para llevar a cabo el diseño racional de nuevos fármacos y materiales.

Competencias:

- Proporcionar a los estudiantes los conocimientos de Química Computacional necesarios para la práctica de la Química.
- Utilizar los métodos de la Química Computacional para resolver problemas químicos relacionados con la estructura molecular, la espectroscopia y la reactividad Química.

Resultados del aprendizaje:

- El alumno conoce el fundamento teórico, las limitaciones y los ámbitos de aplicación de los principales métodos de la Química Computacional.
- El alumno comprende las publicaciones científicas que, dentro de su campo de investigación, utilizan técnicas de Química Computacional.
- El alumno conoce los distintos métodos teóricos que puede utilizar para resolver problemas de estructura, espectroscopia o reactividad.
- El alumno sabe utilizar programas de uso habitual en Química Computacional para resolver estos problemas.
- El alumno sabe utilizar los programas de visualización y análisis adecuados para analizar los resultados de los cálculos computacionales realizados.
- El alumno puede trabajar con las herramientas informáticas necesarias para trabajar con

estaciones de trabajo remotas, realizar cálculos en éstas y transferir ficheros desde o a éstas.

Temario:

Parte I. Química Cuántica.

Tema 1. Superficies de energía potencial.

Tema 2. Métodos variacionales y perturbacionales.

Tema 3. Métodos DFT.

Tema 4. Métodos para incluir el efecto del disolvente.

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

Tema 5. Mecánica Molecular.

Tema 6. Dinámica molecular.

Tema 7. Métodos híbridos QM/MM.

Parte III. Aplicaciones.

Tema 8. Caracterización de SEP: determinación de geometrías moleculares, estados de transición y caminos de reacción.

Tema 9. Espectroscopía RMN, IR, UV/VIS. Estados excitados.

Tema 10. Determinación de parámetros termodinámicos y constantes cinéticas. Cálculo de índices de reactividad. Aplicación de modelos de solvatación a resolución de problemas de reactividad.

Tema 11. 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.

Tema 12. Métodos para el estudio de mecanismos de reacciones enzimáticas de interés biológico.

Bibliografía:

Básica-intermedia.

- [1] Joan Bertran Rusca, Vicenç Branchadell Gallo, Miquel Moreno Ferrer, Mariona Sodupe Roure, *Química cuántica : fundamentos y aplicaciones computacionales*, Síntesis, Madrid, 2000
- [2] Thomas Engel y Philip Read, *Química Física*, Pearson Educación, Madrid, 2006. Capítulo 27 *Química Computacional* escrito por W.J. Hehre.
- [3] Ira N. Levine, *Quantum Chemistry*, Pearson Education, Upper Saddle River, 2009.
- [4] James B. Foresman and AEleen Frisch, *Exploring Chemistry With Electronic Structure Methods: A Guide to Using Gaussian*, Gaussian, 1996.
- [5] Juan Andrés, Juan Beltrán [eds], *Química Teórica y Computacional*, Castellón de La Plana, Universidad Jaime I, 2000.
- [6] C. J. Cramer, *Essentials of Computational Chemistry*, Wiley, 2003
- [7] A. Leach, *Molecular Modelling: Principles and Applications*, Prentice Hall, 2001
- [8] A. Hinchliffe, *Molecular Modelling for Beginners*, Wiley, 2008

Avanzada .

- [9] R. F. Bader, *Atoms in molecules: a quantum theory*, Oxford University Press, 2003.
- [10] F. Weinhold, C. R. Landis, *Valency and Bonding. A Natural Bond Orbital Donor-Acceptor Perspective*, Cambridge University Press, 2005.
- [11] Steven M. Bachrach, *Computational Organic Chemistry*, Wiley-Interscience, New Jersey, 2007.
- [12] M. Olivucci ed., *Computational Photochemistry*, Elsevier, Amsterdam, 2005.
- [13] K. Naidoo, J. Brady, M. Field, J. Gao, M. Hann (eds.), *Modelling Molecular Structure and Reactivity in Biological Systems*, RSC, 2006

Metodología

Modalidades organizativas:	Métodos de enseñanza:
MO1: Clases teóricas MO3: Clases prácticas MO5: Tutorías MO6: Estudio y trabajo en grupo MO7: Estudio y trabajo autónomo del alumno.	ME1: Lección magistral ME2: Estudio de casos. ME3: Resolución de ejercicios y problemas

Organización

Actividades presenciales:	Horas
Clases magistrales. Parte de estas actividades pueden ser impartidas como clases y conferencias por profesores especialistas externos a la UR.	25
Clases prácticas de aula informática.	20
Seminarios	5

Total horas presenciales **50**

Actividades no presenciales (trabajo autónomo):	Horas estimadas
Estudio personal y preparación de clases.	25
Resolución de ejercicios y casos.	25
Desarrollo de un trabajo en grupo.	25

Total horas estimadas de trabajo autónomo **75**

Total horas **125**

Evaluación

Sistemas de evaluación:	% sobre total	Recuperable/ No Recuperable
Evaluación continua de los profesores.	25	No recuperable
Evaluación de las soluciones de ejercicios y casos en aula informática.	25	No recuperable
Autoevaluaciones y cuestionarios	25	No recuperable
Portafolios.	25	No recuperable

Criterios críticos para superar la asignatura: