

MASTER<sup>OO</sup>

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA



# GUÍA DOCENTE

## Química computacional

## ***1. Datos descriptivos de la materia.***

**Carácter:** Optativa

**Convocatoria:** 1<sup>er</sup> cuatrimestre

**Créditos:** 3 ECTS

### **Profesorado:**

#### **M<sup>a</sup> Carmen Villaverde Cameron-Walker**

Catedrática de Universidad  
Departamento de Química Orgánica  
Facultad de Química  
[mc.villaverde@usc.es](mailto:mc.villaverde@usc.es)

#### **Agustín Cobas Martínez**

Profesor Titular de Universidad  
Departamento de Química Orgánica  
Facultad de Química  
[agustin.cobas@usc.es](mailto:agustin.cobas@usc.es)

#### **Jesús A. Varela Carrete**

Profesor Titular de Universidad  
Departamento de Química Orgánica y  
Centro Singular de Investigación en Química Biológica  
e Materiais Moleculares (CIQUS)  
[jesus.varela@usc.es](mailto:jesus.varela@usc.es)

**Idioma en que es impartida:** Castellano, gallego e inglés

## ***2. Situación, significado e importancia de la materia en el ámbito de la titulación.***

### **2.1. Módulo al que pertenece la materia en el Plan de Estudios. Materias con las que se relaciona.**

Módulo 2 (M2) – Especialización. La asignatura se relaciona con "síntesis orgánica avanzada y mecanismos de reacción" del módulo M1. Estas asignaturas son básicas para conocer aspectos estructurales y mecanísticos de las reacciones en química orgánica.

### **2.2. Papel que juega este curso en ese bloque formativo y en el conjunto del Plan de Estudios.**

Esta asignatura estudia los principales métodos computacionales disponibles que permiten explicar y/o predecir diferentes propiedades moleculares y reactividad química desde un punto de vista teórico.

### **2.3. Conocimientos previos (recomendados/obligatorios) que los estudiantes han de poseer para cursar la asignatura.**

Asignaturas del módulo M1.

## ***3. Objetivos del aprendizaje y competencias a alcanzar por el estudiante con la asignatura.***

### **3.1. Objetivos del aprendizaje.**

Este curso pretende dotar al alumno de los fundamentos de los métodos computacionales que se emplean actualmente para el cálculo de la estructura y reactividad moleculares de especies orgánicas, bio-orgánicas y organometálicas. Asimismo se introducirá el manejo de las herramientas prácticas para llevar a cabo estos cálculos. Se pretende que al final del curso el estudiante sea capaz de decidir y aplicar los métodos adecuados a cada problema.

### **3.2. Competencias básicas y generales.**

- CG1 - Trabajar en equipo con eficiencia en su labor profesional y/o investigadora
- CG3 - Acceder a la información necesaria (bases de datos, artículos científicos, etc.) y tener suficiente criterio para su interpretación y empleo
- CG5 - Estar bien adaptados para seguir futuros estudios de doctorado en áreas multidisciplinares
- CG6 - Estar bien adaptados para desarrollar un trabajo en empresas tecnológicas relacionadas con la Química Orgánica.
- CG7 - Presentar públicamente los resultados de una investigación o un informe técnico

### **3.3. Competencias específicas.**

- CE3 - Conocer los métodos más habituales para el estudio teórico de las moléculas orgánicas y los mecanismos de reacción
- CE4 - Conocer y comprender los mecanismos de reacción comúnmente aceptados en Química Orgánica y los métodos disponibles para su determinación

### **3.4. Competencias transversales.**

- CT1 - Manejar las herramientas informáticas y las tecnologías de la información y la comunicación, así como el acceso a bases de datos en línea
- CT4 - Aplicar los conceptos, principios, teorías o modelos relacionados con la Química Orgánica a entornos nuevos o poco conocidos, dentro de contextos multidisciplinares
- CT6 - Demostrar capacidad de aprendizaje y trabajo autónomo para el desarrollo de su vida profesional

## 4. Contenidos del curso.

### 4.1. Epígrafes del curso:

#### Contenidos teóricos:

1. Introducción. Métodos computacionales.
2. Mecánica molecular. Dinámica molecular.
3. Métodos aproximados en mecánica cuántica: método variacional y método de perturbaciones. Aproximación de Born-Oppenheimer. Función de onda polieletrónica.
4. Métodos semiempíricos.
5. Método Hartree-Fock.
6. Métodos avanzados (IC, MP, CC). Teoría del funcional de la densidad. Métodos de análisis de la densidad electrónica. Métodos mixtos
7. Reactividad Química. Superficies de energía potencial.
8. Tratamiento del disolvente.

#### Contenidos prácticos:

1. Cálculos de mecánica y dinámica molecular en química biológica.
2. Optimización de geometrías a distintos niveles de cálculo.
3. Estudios conformacionales.
4. Estudios de isosuperficies.
5. Cálculo y representación de orbitales moleculares.
6. Determinación de estados de transición y cálculo de energías de activación y de reacción.

### 4.2. Bibliografía recomendada:

#### 4.2.1. Básica (manuales de referencia).

- 1.- A. R. Leach, *Molecular Modelling, Principles and applications* (2<sup>nd</sup> Edition) Pearson, **2001**.
- 2.- S. M. Bachrach, *Computational Organic Chemistry* (2<sup>nd</sup> Edition) Wiley, **2014**.
- 3.- C. J. Cramer, *Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models*, (2<sup>nd</sup> Edition) Wiley, **2004**.
- 4.- F. Jensen, *Introduction to Computational Chemistry*, (2<sup>nd</sup> Edition) Wiley, **2007**.
- 5.- J. B. Foresman, A. Frisch, *Exploring Chemistry with electronic Structure Methods*. (2<sup>nd</sup> Edition) Gaussian, Inc. Pittsburgh, PA. **1996**.

#### 4.2.2. Complementaria.

- 1.- B. M. Rode, T. S. Hofer, M. D. Kugler, *The basics of Theoretical and Computational Chemistry*, Wiley, **2007**.
- 2.- I. N. Levine, *Quantum Chemistry* (7<sup>th</sup> Edition), Pearson, **2013**.
- 3.- J. Bertran, V. Branchadell, M. Moreno, M. Sodupe, *Química Cuántica, Fundamentos y Aplicaciones Computacionales* (2<sup>a</sup> Edición), Síntesis, **2002**.

## 5. - Indicaciones metodológicas y atribución de carga ECTS.

### 5.1. Atribución de créditos ECTS.

TRABAJO PRESENCIAL EN EL AULA	HORAS	TRABAJO PERSONAL DEL ALUMNO	HORAS
Clases expositivas en grupo grande	14	Estudio autónomo individual o en grupo	15
Clases interactivas en grupo reducido (Seminarios)	8	Resolución de ejercicios, u otros trabajos propuestos	31
Tutorías en grupo muy reducido	2	Elaboración de ejercicios propuestos.	5
<b>Total horas trabajo presencial en el aula o en el laboratorio</b>	<b>24</b>	<b>Total horas trabajo personal del alumno</b>	<b>51</b>

### 5.2. Actividades formativas en el aula con presencia del profesor

El curso incluye clases expositivas y ejercicios prácticos de cálculo computacional que, idealmente, serían llevados a cabo de forma individual.

### 5.3. Calendario de actividades.

<b>Enero 2016</b>	<b>Lunes</b>	<b>Martes</b>	<b>Miércoles</b>	<b>Jueves</b>	<b>Viernes</b>
16-18 h	11	12	13	14	15
16-18 h	18	19	20	21	22
16-18 h	25	26	27	28	29

<b>Febrero 2016</b>	<b>Lunes</b>	<b>Martes</b>	<b>Miércoles</b>	<b>Jueves</b>	<b>Viernes</b>
16-18 h	1	2	3	4	5
16-18 h	8	9	10	11	12
16-18 h	15	16	17	18	19

	Clases expositivas (teóricas)
	Clases interactivas (Seminarios)
	Clases interactivas (tutorías)
	Días no lectivos (festivos)

## ***6. Indicaciones sobre la evaluación.***

### **6.1. Procedimiento de evaluación.**

La calificación final tendrá en cuenta el resultado de un examen y la evaluación de los ejercicios prácticos.