

# **Escuela de Doctorado y Estudios de Posgrado**

## **Máster Universitario en Química**

### **GUÍA DOCENTE DE LA ASIGNATURA (ESCENARIO 1):**

#### **Química computacional (2021 - 2022)**

## 1. Datos descriptivos de la asignatura

Asignatura: <b>Química computacional</b>	Código: <b>835931914</b>
<ul style="list-style-type: none"><li>- Centro: <b>Escuela de Doctorado y Estudios de Postgrado</b></li><li>- Lugar de impartición: <b>Facultad de Ciencias. Sección de Química</b></li><li>- Titulación: <b>Máster Universitario en Química</b></li><li>- Plan de Estudios: <b>2018 (Publicado en 2014-04-29)</b></li><li>- Rama de conocimiento: <b>Ciencias</b></li><li>- Itinerario / Intensificación:</li><li>- Departamento/s: <b>Química</b></li><li>- Área/s de conocimiento: <b>Química Física</b></li><li>- Curso: <b>1</b></li><li>- Carácter: <b>Optativa</b></li><li>- Duración: <b>Segundo cuatrimestre</b></li><li>- Créditos ECTS: <b>3,0</b></li><li>- Modalidad de impartición: <b>Presencial</b></li><li>- Horario: <b>Enlace al horario</b></li><li>- Dirección web de la asignatura: <b><a href="http://www.campusvirtual.ull.es">http://www.campusvirtual.ull.es</a></b></li><li>- Idioma: <b>Castellano e Inglés (0,15 ECTS en Inglés)</b></li></ul>	

## 2. Requisitos para cursar la asignatura

Ninguno

## 3. Profesorado que imparte la asignatura

Profesor/a Coordinador/a: <b>MARIA PILAR ENCARNACION CARRO REGLERO</b>
- Grupo: <b>Único</b>
<b>General</b> <ul style="list-style-type: none"><li>- Nombre: <b>MARIA PILAR ENCARNACION</b></li><li>- Apellido: <b>CARRO REGLERO</b></li><li>- Departamento: <b>Química</b></li><li>- Área de conocimiento: <b>Química Física</b></li></ul>

**Contacto**

- Teléfono 1: **922318031**
- Teléfono 2:
- Correo electrónico: **pcarro@ull.es**
- Correo alternativo: **pcarro@ull.edu.es**
- Web: **<http://www.campusvirtual.ull.es>**

**Tutorías primer cuatrimestre:**

Desde	Hasta	Día	Hora inicial	Hora final	Localización	Despacho
Todo el cuatrimestre		Martes	12:00	14:00	Sección de Química - AN.3F	17
Todo el cuatrimestre		Miércoles	12:00	14:00	Sección de Química - AN.3F	17
Todo el cuatrimestre		Jueves	12:00	14:00	Sección de Química - AN.3F	17

Observaciones: Las tutorías no presenciales se disponen en el mismo horario que las presenciales. Las tutorías no presenciales se desarrollarán por video llamada por Google Meet o un sistema similar. Para concretar una tutoría no presencial, los alumnos deben primero acordar por correo electrónico fecha y hora con el profesor

**Tutorías segundo cuatrimestre:**

Desde	Hasta	Día	Hora inicial	Hora final	Localización	Despacho
Todo el cuatrimestre		Martes	12:00	14:00	Sección de Química - AN.3F	17
Todo el cuatrimestre		Miércoles	12:00	14:00	Sección de Química - AN.3F	17
Todo el cuatrimestre		Jueves	12:00	14:00	Sección de Química - AN.3F	17

Observaciones: Las tutorías no presenciales se disponen en el mismo horario que las presenciales. Las tutorías no presenciales se desarrollarán por video llamada por Google Meet o un sistema similar. Para concretar una tutoría no presencial, los alumnos deben primero acordar por correo electrónico fecha y hora con el profesor

**4. Contextualización de la asignatura en el plan de estudio**

Bloque formativo al que pertenece la asignatura: **Química Medioambiental**  
 Perfil profesional:

## 5. Competencias

### Básica

**CB06** - Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación

**CB07** - Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio

**CB10** - Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo

### Específica

**CE06** - Utilizar programas informáticos que permitan plantear y resolver problemas de Química Computacional, Modelización molecular y Quimiometría

**CE10** - Manejar los conceptos básicos y la metodología empleada en química computacional

## 6. Contenidos de la asignatura

### Contenidos teóricos y prácticos de la asignatura

Tema 1 : Introducción a la Química Computacional

– Fundamentos teóricos generales

– Métodos de cálculo

Tema 2 : Cálculos ab initio

– Fundamentos

– Conjuntos bases

– Cálculos ab initio. Métodos Hartree-Fock

– Análisis de la superficie de potencial electrónico (PES)

– Cálculos DFT. Comparación con método HF

– Ejemplos de aplicación

• Contenido práctico

1. Introducción al programa de cálculo Gaussian y al programa de visualización Gaussview

2. Optimización de geometrías

3. Orbitales moleculares y análisis de población.

4. Construcción de curvas de energía potencial.

5. Cálculo de las frecuencias de vibración

6. Cálculo de barreras de inversión.

7. Coordenada intrínseca de reacción

8. Termoquímica

9. UV-VIS y transiciones electrónicas.

10. Efecto de solvatación

#### Actividades a desarrollar en otro idioma

Todo el software que deben aplicar en las sesiones prácticas está en inglés. Asimismo los guiones de la mayor parte de las prácticas que se les proporciona al alumno están en inglés. La documentación que se les proporciona en formato pdf está en gran parte en inglés.

### 7. Metodología y volumen de trabajo del estudiante

#### Descripción

Toda la actividad docente no presencial se realizará a través de video llamada por Google Meet o sistema equivalente. En el escenario 1 y si las circunstancias sanitarias lo permiten los seminarios, tutorías y exámenes se realizarán de forma presencial respetando las medidas de seguridad vigentes.

La metodología docente a emplear se basará en lecciones presenciales impartidas por el profesor, con ayuda de métodos audiovisuales. Se suministrará al alumno el material necesario para el seguimiento de los temas, además de recomendar páginas web adecuadas para complementar lo explicado en clase. Estas explicaciones irán seguidas de clases prácticas y seminarios en el aula de informática, con el objeto de poner en práctica lo explicado y profundizar en el conocimiento del tema. Además se impartirán 2 horas de tutorías donde el alumno podrá exponer las dudas y dificultades encontradas en la realización de los ejercicios prácticos.

#### Actividades formativas en créditos ECTS, su metodología de enseñanza-aprendizaje y su relación con las competencias que debe adquirir el estudiante

Actividades formativas	Horas presenciales	Horas de trabajo autónomo	Total horas	Relación con competencias
Clases teóricas	12,00	0,00	12,0	[CE10], [CE06], [CB10], [CB07], [CB06]
Clases prácticas (aula / sala de demostraciones / prácticas laboratorio)	16,00	0,00	16,0	[CE10], [CE06], [CB10], [CB07], [CB06]
Asistencia a tutorías	2,00	0,00	2,0	[CB10]
Estudio autónomo	0,00	18,00	18,0	[CE10], [CB10]

Preparación de seminarios, elaboración de memorias y/o informes de las prácticas realizadas, resolución de ejercicios que le haya entregado el profesor, preparación de debates, preparación de exposición oral, lecturas recomendadas, búsquedas bibliográfica	0,00	27,00	27,0	[CB10], [CB07], [CB06]
Total horas	30,00	45,00	75,00	
Total ECTS			3,00	

## 8. Bibliografía / Recursos

### Bibliografía Básica

– Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods. Foresman, J. B. y Frisch A. Gaussian Inc. 1996.– Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models. Christopher J. Cramer, John Wiley & Sons, 2004– Introduction to Computational Chemistry. Frank Jensen, John Wiley & Sons, 2007– Química Cuántica, I.N. Levine, Ed. Prentice Hall, 2001

### Bibliografía Complementaria

### Otros Recursos

## 9. Sistema de evaluación y calificación

### Descripción

La evaluación continua consta de los siguientes elementos:

- La asistencia y participación en las clases teóricas y en el aula de informática
- Preparación y defensa de los informes que sean solicitados.

La asistencia a las clases prácticas en el aula de informática es obligatoria, para poder aprobar la asignatura se deberá haber realizado las prácticas.

En el resto de las convocatorias se realizará un evaluación única que consistirá en un examen teórico-práctico sobre los contenidos de la asignatura y su calificación final será la correspondiente a dicho examen. En el supuesto de que se

hubiesen superado, la calificación de las prácticas del aula de informática obtenida en la evaluación continua se tendrá en cuenta en la evaluación única.

#### Estrategia Evaluativa

Tipo de prueba	Competencias	Criterios	Ponderación
Pruebas de ejecuciones de tareas reales y/o simuladas	[CB07], [CB10], [CE10]	SE8 - Evaluación de las actividades no presenciales relacionadas con las clases en aula de informática: memorias, informes de las prácticas o ejercicios resueltos entregados Se valorará: - Dominio de los contenidos de la asignatura. - Estructura, originalidad y presentación. - Discusión e interpretación de los resultados.	60,00 %
Técnicas de observación	[CB06], [CB07], [CE06], [CE10]	SE1 – Evaluación continua: Control de asistencia y participación activa en todas las actividades de la asignatura (en clase y en el aula virtual) Se valorará la asistencia y participación activa en todas las actividades de la asignatura (en clase y en el aula virtual).	40,00 %

### 10. Resultados de Aprendizaje

Decidir la aplicabilidad de la química computacional a un problema práctico concreto.  
Elegir y aplicar el nivel de cálculo necesario para cada tarea.  
Expresar los resultados de los cálculos en lenguaje químico convencional.

### 11. Cronograma / calendario de la asignatura

#### Descripción

La fecha en que se realizarán la prueba final contemplada en la evaluación continua de la convocatoria de junio y la evaluación única en las diferentes convocatorias se puede consultar en [http://www.ull.es/view/master/mquimica/Calendario\\_de\\_examenes/es](http://www.ull.es/view/master/mquimica/Calendario_de_examenes/es)

Por último, destacar que la distribución de los temas por semana en el cronograma es orientativa, pudiendo sufrir cambios según las necesidades de organización docente.

#### Primer cuatrimestre

Semana	Temas	Actividades de enseñanza aprendizaje	Horas de trabajo presencial	Horas de trabajo autónomo	Total

Semana 3:			0.00	0.00	0.00
Total			0.00	0.00	0.00
<b>Segundo cuatrimestre</b>					
Semana	Temas	Actividades de enseñanza aprendizaje	Horas de trabajo presencial	Horas de trabajo autónomo	Total
Semana 1:	Tema 1	Clase de teoría Tutorías Prácticas aula	1.50	2.25	3.75
Semana 2:	Tema 1	Clase de teoría Tutorías Prácticas aula	9.00	13.50	22.50
Semana 3:	Tema 1	Clase de teoría Tutorías Prácticas aula	9.00	13.50	22.50
Semana 4:	Tema 1	Clase de teoría Tutorías Prácticas aula	6.00	9.00	15.00
Semana 5:	Tema 1	Clase de teoría Tutorías Prácticas aula	4.50	6.75	11.25
Semana 13:			0.00	0.00	0.00
Total			30.00	45.00	75.00