

1. Identificación de la asignatura

NOMBRE	Simulaciones Computacionales en Química		CÓDIGO	GQUIMI01-0-012
TITULACIÓN	Graduado o Graduada en Química	CENTRO	Facultad de Química	
TIPO	Optativa	Nº TOTAL DE CREDITOS	6.0	
PERIODO	Segundo Semestre	IDIOMA	Español	
COORDINADOR/ES		EMAIL		
Sordo Gonzalo José Ángel		jasg@uniovi.es		
PROFESORADO		EMAIL		
Sordo Gonzalo José Ángel		jasg@uniovi.es		

2. Contextualización

La asignatura "Simulaciones Computacionales en Química" corresponde a la materia "Química Aplicada" del Módulo Optativo. Sus contenidos se circunscriben dentro del marco de la Química Computacional, la cual introduce técnicas operacionales que permiten resolver los modelos introducidos por la Química Teórica para describir los sistemas químicos. Asimismo, la Química Computacional incluye como objetivo fundamental el testar la validez de esos modelos por comparación de los resultados procedentes de simulaciones teóricas con aquéllos procedentes del experimento. En un contexto más general, la Química Computacional se incardina dentro de la Química Física, materia ésta que "ofrece el conocimiento físico a la Química, con el fin de serle útil".

La Química Computacional combina las tres teorías de la Química Física: Termodinámica, Termodinámica Estadística y Mecánica Cuántica, junto con técnicas propias de la Cinética Química, para abordar el estudio global de los sistemas químicos empleando computadores.

La asignatura "Simulaciones Computacionales en Química" forma parte del Módulo Optativo del Grado en Química y no exige requisitos previos. El programa que presentamos realiza una introducción elemental a la programación y al cálculo numérico para posteriormente aplicar paquetes de programas computacionales estándar al estudio de distintos sistemas y procesos químicos de interés general. Aunque, sin duda, el contenido del programa docente resulte imprescindible para el currículum del químico teórico, dicho programa se ha confeccionado llevando en mente, como objetivo prioritario, el proporcionar una herramienta asequible, de gran utilidad, al químico experimental.

3. Requisitos

Conocimientos sólidos de todas las materias incluidas en el Módulo Básico.

4. Competencias y resultados de aprendizaje

Competencias generales:

De entre las competencias generales recogidas en la Memoria del Grado en Química resaltamos para la presente materia las siguientes:

GG-1. Demostrar capacidad de análisis y síntesis.

CG-2. Resolver problemas de forma efectiva

CG-7. Utilizar un idioma extranjero, preferiblemente inglés.

GG-8. Expresarse correctamente (tanto en forma oral como escrita) en castellano.

GG-9. Aprender de forma autónoma.

CG-11. Adquirir motivación por la calidad.

GG-17. Desarrollar el razonamiento crítico.

Competencias específicas:

De entre las competencias específicas recogidas en la Memoria del Grado en Química resaltamos para la presente materia las siguientes:

CE-2. Relacionar las propiedades macroscópicas con las de los átomos y moléculas individuales.

CE-7. Aplicar los principios de la termodinámica y sus aplicaciones en Química.

CE-8. Comprender la cinética del cambio químico, incluyendo la catálisis y los mecanismos de reacción.

CE-19. Demostrar conocimiento y comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionadas con las áreas de la Química.

CE-24. Procesar y computar datos, en relación con la información y datos químicos.

CE-28. Planificar, diseñar y ejecutar investigaciones prácticas, desde la etapa problema-descubrimiento hasta la evaluación y valoración de los resultados y descubrimientos.

Resultados de aprendizaje:

1. Ser capaz de plantear experimentos y cuestiones teóricas y emplear las herramientas proporcionadas por la Química Computacional para proceder a su resolución y posterior interpretación de los resultados obtenidos.

5. Contenidos

Los contenidos generales de la asignatura son los siguientes:

Introducción a la programación y a los métodos numéricos en Química. Simulación en Química Cuántica. Simulación en Termodinámica Estadística. Simulación en Cinética Química.

Se desarrollarán los mismos ajustándonos lo máximo posible al siguiente programa:

1. Introducción a la programación y a los métodos numéricos en Química (*semanas 1-4*).

1.1. Breve introducción a la programación: Sistemas operativos (Linux, Microsoft Windows). Lenguajes de programación (FORTRAN).

1.2. Breve introducción a los métodos numéricos: Generalidades sobre algunos algoritmos matemáticos empleados en Química Computacional: Integración, Resolución de ecuaciones diferenciales, Operaciones matriciales, Optimización.

1.3. Generalidades sobre los paquetes de programas empleados en la Química Computacional. Aplicaciones gráficas.

2. Simulación en Química Cuántica (*semanas 5-7*).

2.1. Predicción teórica conformacional de moléculas.

2.2. Predicción teórica de espectros.

2.3. Predicción teórica estructural de moléculas en fase gas y en disolución.

3. Simulación en Termodinámica Estadística (*semanas 8-9*).

3.1. Predicción teórica de magnitudes termodinámicas a partir de cálculos mecano-cuánticos.

4. Simulación en Cinética Química (*semanas 10-13*).

4.1. Predicción teórica de mecanismos de reacción.

4.2. Predicción teórica de ecuaciones cinéticas.

6. Metodología y plan de trabajo

HORAS PRESENCIALES (60 horas)

Clases expositivas (25 horas; semanas 1-4; 16 horas, semanas 5-13; 9 horas): En ellas se presentará, analizará y desarrollará, de forma didáctica, el material recogido en el apartado de contenidos del anterior epígrafe.

Se incentivará la intervención de los alumnos, planteando cuantas cuestiones crean oportunas a lo largo de la exposición. En este sentido, uno de los principales objetivos del profesor será la de incentivar la participación del alumnado

Se persigue un protagonismo dual, inherente a la impartición de una disciplina computacional: Inicialmente, el profesor señalará los desarrollos matemáticos que el alumno debe trabajar por sí mismo, con ayuda de la bibliografía recomendada. Asimismo, a lo largo de la exposición, el profesor planteará problemas numéricos relacionados con las materias presentadas. Finalmente, el profesor planteará cuestiones clave a lo largo de cada sesión que deberán ser analizadas y resueltas por los alumnos.

Durante las semanas 1-4 se destinarán las 16 horas disponibles a la labor expositiva, familiarizando al alumno con las herramientas computacionales (*software* y *hardware*) y las técnicas matemáticas necesarias para llevar a cabo las simulaciones recogidas en el apartado 5 de esta Guía. A lo largo de las semanas restantes (5-13) se dedicará 1 hora a la exposición de objetivos, reservándose el resto al trabajo computacional que debe llevar a cabo el alumno para realizar las simulaciones recogidas en el apartado 5 de esta Guía (ver prácticas de aula).

Prácticas de aula(25 horas; semanas 5-13): Una vez identificados los objetivos de cada sesión, los alumnos, empleando los medios computacionales (ordenadores y programas de cálculo) disponibles en el aula de informática donde se impartan las clases, llevarán a cabo los cálculos requeridos para resolver las cuestiones propuestas por el profesor, aplicando así los conocimientos adquiridos a casos prácticos de interés. Durante esta fase, el profesor debe actuar como consultor, reservando para los alumnos el papel protagonista.

Los alumnos plantearán todas aquellas cuestiones que permitan optimizar la consecución de objetivos de las sesiones dedicadas a desarrollar las clases expositivas. En particular, se analizará, de forma colectiva, el progreso de los cálculos realizados por los alumnos en dichas sesiones.

Tutorías grupales (3 horas; semanas 8, 11 y 13): En ellas los alumnos plantearán cuantas dudas les puedan surgir a medida que elaboran la Memoria (ver apartado 7 de esta Guía). Evidentemente, los alumnos deben tomar la iniciativa en este tipo de sesiones. Los estudiantes dispondrán con suficiente antelación de los enunciados de las cuestiones y ejercicios que deben resolver de forma individual, o colectiva, antes de la tutoría.

Sesiones de Evaluación(3 horas; semana 14): En ellas el alumno realizará una presentación (oral o escrita) acerca de la forma en la que ha abordado la elaboración de la Memoria que recogerá los resultados de los problemas resueltos en las prácticas de aula y el análisis de las cuestiones planteadas en las clases expositivas y que constituirá el elemento fundamental para la evaluación de la asignatura (ver siguiente apartado).

HORAS NO PRESENCIALES (90 horas)

Trabajo en grupo (10 horas): En ellas los alumnos debieran realizar puestas en común sobre el análisis de los materiales que constituyen el programa, compartiendo bibliografía y puntos de vista contrapuestos/complementarios para abordar la resolución numérica de las cuestiones

abordadas en las prácticas de aula.

Trabajo autónomo (80 horas): En ellas los alumnos deben aplicarse individualmente para completar el trabajo desarrollado en las clases expositivas. La conexión a través de *Internet* les permitirá tener acceso a los medios computacionales empleados en las clases presenciales.

7. Evaluación del aprendizaje de los estudiantes

La calificación definitiva en la convocatoria ordinaria se basará en: (a) calificación de una Memoria que recogerá de una manera pormenorizada los cálculos realizados por el alumno a lo largo de las prácticas de aula, analizando los resultados obtenidos y señalando las conclusiones alcanzadas en cada temática abordada. Esta contribución representará un 80% a la nota final, y (b) participación del alumno en las clases expositivas, prácticas de aula y tutorías grupales, que contribuirá con un 20% de la nota final.

La calificación definitiva en las convocatorias extraordinarias se obtendrá valorando el desarrollo por parte del alumno de una simulación computacional concreta, propuesta por el profesor.

8. Recursos, bibliografía y documentación complementaria

Fisicoquímica, Ira N. Levine, Vols. 1 y 2, 5ª edición, McGraw-Hill, Madrid, 2004.

Physical Chemistry, Ira N. Levine, 6th edition, McGraw-Hill, Boston, 2009.

Química Cuántica, Ira N. Levine, 5ª edición, Pearson Educativa S.A. Madrid, 2001.

Quantum Chemistry, Ira N. Levine, 6th Economy Edition, Prentice Hall, 2008.

Gaussian Online Manual, www.gaussian.com.