

Año académico	2015-16
Asignatura	11368 - Química Orgánica Computacional
Grupo	Grupo 1, 1S
Guía docente	A
Idioma	Castellano

## Identificación de la asignatura

<b>Asignatura</b>	11368 - Química Orgánica Computacional
<b>Créditos</b>	1,44 presenciales (36 horas) 4,56 no presenciales (114 horas) 6 totales (150 horas).
<b>Grupo</b>	Grupo 1, 1S
<b>Período de impartición</b>	Primer semestre
<b>Idioma de impartición</b>	Castellano

## Profesores

Profesor/a	Horario de atención a los alumnos					
	Hora de inicio	Hora de fin	Día	Fecha inicial	Fecha final	Despacho
Pere Maria Deyà Serra <a href="mailto:pere.deya@uib.es">pere.deya@uib.es</a>	14:00	15:00	Miércoles	15/10/2015	31/07/2016	QO-207 confirmar per email
Antonio Frontera Beccaria <a href="mailto:toni.frontera@uib.es">toni.frontera@uib.es</a>	13:00	14:00	Viernes	06/07/2015	31/08/2016	QO-215
David Quiñonero Santiago <a href="mailto:david.quinonero@uib.es">david.quinonero@uib.es</a>	10:00	18:30	Miércoles	21/09/2015	01/02/2016	QO-215
María del Carmen Rotger Pons <a href="mailto:carmen.rotger@uib.es">carmen.rotger@uib.es</a>	16:00	17:00	Jueves	14/09/2015	27/05/2016	206

## Contextualización

### PROFESORADO:

David Quiñonero es doctor en Química por la Universitat de les Illes Balears (UIB) y en la actualidad forma parte del grupo de Química Supramolecular de la UIB, desarrollando su investigación en el campo del estudio teórico de interacciones no covalentes. Asimismo, desde hace años ha venido impartiendo la asignatura de Química Orgánica Computacional del Máster de Ciencia y Tecnología Química (MCTQ), con un contenido muy parecido a la asignatura del nuevo plan de estudios del Máster en Ciencia y Tecnología Química (MCTE).

Pere M. Deyà (doctor en Química, 1980) es catedrático en Química Orgánica. Ha publicado unos 160 artículos en revistas indexadas, la mayoría ellos en el campo de la Química Computacional. Tiene reconocido el número máximo (seis) de quinquenios docentes y de sexenios de investigación.

Antonio Frontera (doctor en QUímica, 1994) es profesor titular de la UIB. Su contribución en el campo de la Química Computacional se traduce en más de un centenar de publicaciones en revistas de prestigio internacional. Además, desde hace años ha venido impartiendo la asignatura de Química Orgánica Computacional del Máster de Ciencia y Tecnología Química (MCTQ), con un contenido muy parecido a la asignatura del nuevo plan de estudios del Máster en Ciencia y Tecnología Química (MCTE).

### ASIGNATURA:

Este curso persigue, como objetivo central, que los alumnos adquieran los conceptos teóricos básicos sobre los que se fundamentan los diferentes métodos de cálculo de modelización molecular disponibles y que, a lo largo del curso, vayan formando el criterio necesario para seleccionar el método más apropiado para resolver



Año académico	2015-16
Asignatura	11368 - Química Orgánica Computacional
Grupo	Grupo 1, 1S
Guía docente	A
Idioma	Castellano

un problema concreto y, además, saquen el máximo partido a los recursos (hardware y software) de que dispongan.

Para poder conseguir el fin propuesto, el programa contempla, en primer lugar, una introducción a la utilización de bases de datos estructurales (capítulo 1), concretamente de la Cambridge Structural Database, como fuente de información experimental adecuada y útil tanto para iniciar estudios de análisis conformacional como para predecir estructuras de compuestos nuevos.

Los capítulos segundo y tercero del programa se centran en el estudio de los modelos fundamentados en la mecánica cuántica y en la teoría del funcional de la densidad, respectivamente. En ambos casos se estructura la materia en tres niveles, empezando con la capacidad de los diferentes métodos para asociar una energía a cualquier disposición espacial de los diferentes átomos del sistema que se pretende estudiar, permitiendo al usuario determinar los cambios de energía asociados a las diferentes posiciones de los átomos integrantes. En un segundo nivel, se aborda el cálculo en sí mismo, mediante la optimización de geometrías. En el tercer nivel, se analizan los resultados de los cálculos tanto para evaluar las propiedades como para comprobar que se han llevado a cabo correctamente.

El curso ha sido diseñado a partir del trabajo que los profesores responsables vienen desarrollando dentro del grupo de investigación de Química Supramolecular de la UIB.

## Requisitos

### Esenciales

Tener conocimientos básicos de Química Cuántica y Química Orgánica.

### Recomendables

Tener conocimientos básicos de Química Física Orgánica.

## Competencias

### Específicas

- \* No tiene.

### Genéricas

- \* Capacidad para aplicar el conocimiento a la práctica, particularmente para la resolución de problemas relacionados con información cuali y cuantitativa..
- \* Capacidad para obtener y analizar información de fuentes primarias y secundarias, incluyendo Internet..
- \* Capacidad de trabajar de forma autónoma y en grupo y capacidad para planificar y administrar el tiempo..



Año académico	2015-16
Asignatura	11368 - Química Orgánica Computacional
Grupo	Grupo 1, 1S
Guía docente	A
Idioma	Castellano

### Básica

\* Se pueden consultar las competencias básicas que el estudiante tiene que haber adquirido al finalizar el máster en la siguiente dirección: [http://estudis.uib.cat/es/master/comp\\_basiques/](http://estudis.uib.cat/es/master/comp_basiques/)

## Contenidos

### Contenidos temáticos

#### Unidad 1. Bases de datos cristalográficas

- Cambridge Structural Database (CSD): localización y tratamiento de información cristalográfica a través del software.
- Ejemplos de aplicaciones prácticas con el software ConQuest 1.16 para Windows.

#### Unidad 2. Química cuántica

- Métodos en Mecánica Cuántica: Introducción. Mecánica Cuántica. Átomos monoeléctricos. Átomos polielectricos y moléculas. El método Hartree-Fock. Funciones de base. Correlación electrónica: Métodos Möller-Plesset y de interacción de configuraciones. Métodos aproximados para sistemas poliatómicos: Métodos semiempíricos (MNDO, AM1, PM3).
- Geometrías, Energías y Propiedades: Métodos de minimización de la energía potencial y de su derivada: Determinación de geometrías. Exploración de las superficies de energía potencial: mínimos de energía y estados de transición. Propiedades moleculares: potenciales de ionización, afinidades electrónicas. Frecuencias vibracionales y propiedades termodinámicas: entropías, efectos isotópicos, correcciones debidas a la energía vibracional en el punto cero (ZPE). Propiedades electrónicas: momentos dipolares y distribución de carga molecular.
- Aplicaciones de las diferentes teorías al estudio de propiedades de moléculas orgánicas y de su reactividad. Utilización del programa Gaussian 03.

#### Unidad 3. Teoría del funcional de la densidad: fundamentos y aplicaciones en química computacional.

- Conceptos básicos y formalismo: Métodos convencionales de la Química Cuántica. Teoría del funcional de la densidad. Los teoremas de Hohenberg\_Kohn. El método de Kohn-Sham. Potenciales efectivos. Los valores propios de Kohn-Sham. Extensión a los sistemas de capas abiertas.
- Functionales de correlación y de intercambio: La fórmula de la conexión adiabática. Functionales aproximados. Aproximación de la densidad de espin local. Aproximación generalizada de gradientes. Functionales con intercambio exacto. Functionales híbridos. Evaluación crítica de los functionales aproximados.
- Aplicaciones seleccionadas de cálculos basados en la Teoría del Funcional de la Densidad al estudio teórico de la estructura electrónica y la reactividad de moléculas orgánicas. Utilización del programa Gaussian 03.

## Metodología docente



Año académico	2015-16
Asignatura	11368 - Química Orgánica Computacional
Grupo	Grupo 1, 1S
Guía docente	A
Idioma	Castellano

### Actividades de trabajo presencial

Modalidad	Nombre	Tip. agr.	Descripción	Horas
Clases teóricas	Clases magistrales	Grupo grande (G)	Mediante el método expositivo el profesor establecerá los fundamentos teóricos de las unidades didácticas que componen la materia. Además se dará información sobre el método de trabajo aconsejable y el material didáctico que habrá de utilizar el alumnado para preparar de forma autónoma los contenidos.	16
Seminarios y talleres	Seminarios presenciales	Grupo mediano (M)	Mediante el método de resolución de ejercicios y problemas el alumno pondrá en práctica los procedimientos y técnicas expuestos en las clases teóricas	18
Evaluación	Pruebas orales	Grupo grande (G)	El estudiante dispondrá de material didáctico específico para preparar el contenido de la exposición y el asesoramiento del profesorado. El profesorado y el resto del alumnado realizarán preguntas al finalizar la exposición que ayudarán a la evaluación de la actividad.	2

Al inicio del semestre estará a disposición de los estudiantes el cronograma de la asignatura a través de la plataforma UIBdigital. Este cronograma incluirá al menos las fechas en las que se realizarán las pruebas de evaluación continua y las fechas de entrega de los trabajos. Asimismo, el profesor o la profesora informará a los estudiantes si el plan de trabajo de la asignatura se realizará a través del cronograma o mediante otra vía, incluida la plataforma Campus Extens.

### Actividades de trabajo no presencial

Modalidad	Nombre	Descripción	Horas
Estudio y trabajo autónomo individual	Análisis crítico de uno o varios trabajos científicos	El alumno realizará uno o varios informes escritos en el que deberá analizar críticamente los trabajos científicos asignados individualmente.	30
Estudio y trabajo autónomo individual	Preparación de las exposiciones orales	Cada alumno tendrá dos semanas para preparar la exposición oral del tema asignado.	30
Estudio y trabajo autónomo individual	Preparación de las unidades didácticas	Después de la exposición del profesor en las clases magistrales de las unidades didácticas, el alumno habrá de profundizar en la materia. Para facilitar esta tarea se indicará en cada unidad didáctica la bibliografía que se ha de consultar.	50
Estudio y trabajo autónomo en grupo	Análisis crítico de uno o varios trabajos científicos	Los alumnos realizarán en grupo análisis críticos de los trabajos científicos expuestos por los otros alumnos.	4



Año académico	2015-16
Asignatura	11368 - Química Orgánica Computacional
Grupo	Grupo 1, 1S
Guía docente	A
Idioma	Castellano

## Riesgos específicos y medidas de protección

Las actividades de aprendizaje de esta asignatura no conllevan riesgos específicos para la seguridad y salud de los alumnos y, por tanto, no es necesario adoptar medidas de protección especiales.

## Evaluación del aprendizaje del estudiante

### Pruebas orales

Modalidad	Evaluación
Técnica	Pruebas orales ( <b>no recuperable</b> )
Descripción	El estudiante dispondrá de material didáctico específico para preparar el contenido de la exposición y el asesoramiento del profesorado. El profesorado y el resto del alumnado realizarán preguntas al finalizar la exposición que ayudarán a la evaluación de la actividad.
Criterios de evaluación	Eficacia del formato de presentación para la comprensión de la materia. Adecuación del ritmo de exposición. Adecuación del orden de los contenidos. Claridad de la exposición para la comprensión de la materia. Grado de preparación de la materia para la exposición.

Porcentaje de la calificación final: 50%

### Análisis crítico de uno o varios trabajos científicos

Modalidad	Estudio y trabajo autónomo individual
Técnica	Trabajos y proyectos ( <b>recuperable</b> )
Descripción	El alumno realizará uno o varios informes escritos en el que deberá analizar críticamente los trabajos científicos asignados individualmente.
Criterios de evaluación	Se evaluará la utilización de conceptos y procedimientos propios de la materia, así como las aportaciones personales que reflejen la adquisición de las competencias específicas y genéricas de la materia. También se evaluará la presentación de los informes de acuerdo con la calidad y estructura de un trabajo científico.

Porcentaje de la calificación final: 50%

## Recursos, bibliografía y documentación complementaria

### Bibliografía básica

Leach, Andrew R.  
Molecular modelling :principles and applications /Andrew R. Leach.  
2nd ed. Harlow, England ;New York :Prentice Hall,2001.  
Cramer, Christopher J.,  
Essentials of computational chemistry :theories and models /Christopher J. Cramer.  
West Sussex, England :J. Wiley,c2002.

### Bibliografía complementaria





---

Año académico	2015-16
Asignatura	11368 - Química Orgánica Computacional
Grupo	Grupo 1, 1S
Guía docente	A
Idioma	Castellano

Ragué Schleyer, Paul von.

Encyclopedia of computational chemistry /editor-in-chief, Paul von Ragué Schleyer.  
Chichester :John Wiley,c1998.

Parr, Robert G.

Density-functional theory of atoms and molecules /Robert G. Parr and Weitao Yang.  
New York :Oxford University Press;Oxford :Clarendon Press,1989.

Modern density functional theory :a tool for chemistry /edited by J.M. Seminario, P. Politzer.  
Amsterdam ;Oxford :Elsevier,1995.

Chemical applications of density-functional theory /ed., Brian B. Laird,Richard B. Ross, Tom Ziegler.  
Washington, DC :American Chemical Society,1996.

