



DATOS IDENTIFICATIVOS

Química Teórica

Materia	Química Teórica			
Código	V11M029V01138			
Titulación	Máster Universitario en Química Avanzada. RD. 1393/2007			
Descritores	Creditos ECTS	Sinale	Curso	Cuadrimestre
	4	OP	1	1c
Lingua de impartición				
Departamento	Química física			
Coordinador/a	Mosquera Castro, Ricardo Antonio			
Profesorado	Graña Rodriguez, Ana Maria Mosquera Castro, Ricardo Antonio			
Correo-e	mosquera@uvigo.es			
Web				
Descrición xeral				

Competencias de titulación

Código			
A1	Coñecemento da terminoloxía avanzada química		
A2	Coñecemento dos principios físico-químicos fundamentais que regulan os aspectos máis avanzados da Química		
A3	Coñecemento dos aspectos máis avanzados dos elementos e compostos inorgánicos e orgánicos, así como biomoléculas, as rutas sintéticas e a súa caracterización estrutural		
B1	Capacidade para deseñar, coordinar e realizar proxectos de investigación científica		
B3	Capacidade de comunicación (oral e escrita) en lingua oficial e inglés		
B4	Capacidade para a xestión e tratamento de datos e xeración de información e coñecemento		
B5	Capacidade de resolución eficaz e eficiente de problemas demostrando principios de orixinalidade e auto-dirección		
B6	Capacidade de aprendizaxe autónomo para o desenvolvemento continuo		

Competencias de materia

Resultados previstos na materia	Tipoloxía	Resultados de Formación e Aprendizaxe
Coñecer cómo se relacionan os parámetros microscópicos calculables por Química Teórica coas magnitudes macroscópicas medibles experimentalmente.	saber	A2
Coñece-las características dos principais métodos da Química Computacional (métodos cuánticos Hartree-Fock e post-Hartree-Fock, e métodos de mecánica molecular).	saber	A1 A2
Coñece-las principais limitacións dos métodos anteriores: tamaño do conxunto base, inadecuado tratamento da correlación electrónica, disociación iónico-covalente, consistencia do tamaño.	saber saber facer	A1 A2
Coñecer como as limitacións anteriores condicionan o cálculo de diferentes propiedades.	saber facer	A2
Coñecer e utilizar as técnicas de cálculo que permiten correxi-los efectos das limitacións anteriores no cálculo de propiedades de moléculas e agregados moleculares: método de contrapeso, procesos isoxiros, isodésimicos e homo e hiperhomodesmóticos.	saber facer	A1 A2
Coñecer e saber aplica-los tratamentos computacionais máis habituais para ter en conta a solvatación do sistema.	saber saber facer	A1 A2
Coñecer, coas súas limitacións, e saber calcula-los principais índices para a predicción de reactividades.	saber saber facer	A2 A3

Responsabilizarse na realización de traballo individual	saber facer	B5 B6
Empregar ordenadores para o cálculo de propiedades moleculares	saber facer	B4
Presentar datos en gráficos e taboas	saber facer	B4
Análise de resultados empregando linguaxe científica	saber facer	B1 B3 B4

Contidos

Tema	
Conceptos básicos de Mecánica Estatística.	Colectivo canónico. Función de partición canónica para un sistema de partículas que non interaccionan. Función de partición canónica dun gas ideal puro. Ley de distribución de Boltzmann para moléculas no interaccionantes. Termodinámica estadística para gases ideais monoatómicos y diatómicos. Termodinámica estadística de gases ideais poliatómicos. Termodinámica estadística de fluidos reais: fuerzas intermoleculares e integral de configuración.
Método HF.	Introducción. Energía de una función monodeterminantal. Minimización de la energía. Energía de los orbitales y teorema de Koopmans. Sistemas de capa cerrada. Aproximación CLOA. Ecuaciones de Roothaan-Hall. Aproximación CLOA. Sistemas de capa abierta. Conjuntos de funciones base.
Métodos DFT.	Limitaciones del método HF. teoremas de Hohenberg y Kohn. Sistema de referencia Kohn-Sham. Aproximaciones para estimar la energía de correlación-intercambio.
Métodos post-HF	Interacción de configuraciones. Métodos multiconfiguracionales. Método de perturbación de Moller-Plesset. Métodos Coupled Cluster.
Técnicas para el cálculo de propiedades energéticas.	Cálculo preciso de energías. Procesos isógiros e isodésmicos. error de superposición de base.
Análisis conformacional.	Puntos estacionarios de la SEP. Búsqueda de confórmeros.
Técnicas e índices computacionales para el estudio de la reactividad química.	Análisis de población de Mulliken. Análisis de población basado en PEM. Teoría de átomos en Moléculas. NBO. Ejemplos.
Mecánica Molecular.	Definición de campo de fuerzas. campos de fuerzas más frecuentes. Ejemplos.

Planificación

	Horas na aula	Horas fóra da aula	Horas totais
Sesión maxistral	16	32	48
Seminarios	4	10	14
Prácticas en aulas de informática	10	14	24
Probas prácticas, de execución de tarefas reais e/ou simuladas.	4	4	8
Probas de resposta curta	2	4	6

*Os datos que aparecen na táboa de planificación son de carácter orientador, considerando a heteroxeneidade do alumnado.

Metodoloxía docente

	Descrición
Sesión maxistral	Exposición dos temas por parte do profesor
Seminarios	Resolución de problemas, cuestións e debate sobre a materia.
Prácticas en aulas de informática	Prácticas computacionais.

Atención personalizada

Probas	Descrición
Probas prácticas, de execución de tarefas reais e/ou simuladas.	
Probas de resposta curta	

Avaliación

	Descrición	Cualificación
Seminarios	Entrega ou resolución de exercicios e cuestións.	30
Probas prácticas, de execución de tarefas reais e/ou simuladas.	Prácticas computacionais	40
Probas de resposta curta	Proba sobre cuestións teóricas.	30

Outros comentarios sobre a Avaliación

Bibliografía. Fontes de información

J. Andrés, J. Beltrán, **Química Teórica y Computacional**, 2000,

F. Jensen, **Introduction to Computational Chemistry**, 2006,

A. Szabo, N. S. Ostlund, **Modern Quantum Chemistry**, 1996,

J. Bertrán, V. Branchadell, M. Moreno, M. Sodupe, **Química Cuántica**, 2000,

I. N. Levine, **Fisicoquímica**, 2003,

Recomendacións

Materias que continúan o temario

Estrutura Electrónica Molecular/V11M029V01134
