

QUÍMICA COMPUTACIONAL (Código 16378)

Titulación: Grado en Química

Carácter: Optativo

Curso: 4º

Semestre: 1º

UAM

Universidad Autónoma
de Madrid



FACULTAD DE
CIENCIAS

excelencia Campus Internacional UAM+
CSIC

Química Computacional

- La Química Computacional es una rama de la Química que utiliza computadoras para ayudar a estudiar y resolver problemas químicos mediante simulaciones computacionales de sistemas moleculares.
- El alumno se iniciará en las aplicaciones de los diferentes métodos de cálculo. Además, aprenderá el uso del software necesario.
- El curso se organiza en clases de dos horas con el fin de hacerlo fundamentalmente práctico, centrándonos en las aplicaciones a problemas de interés químico.

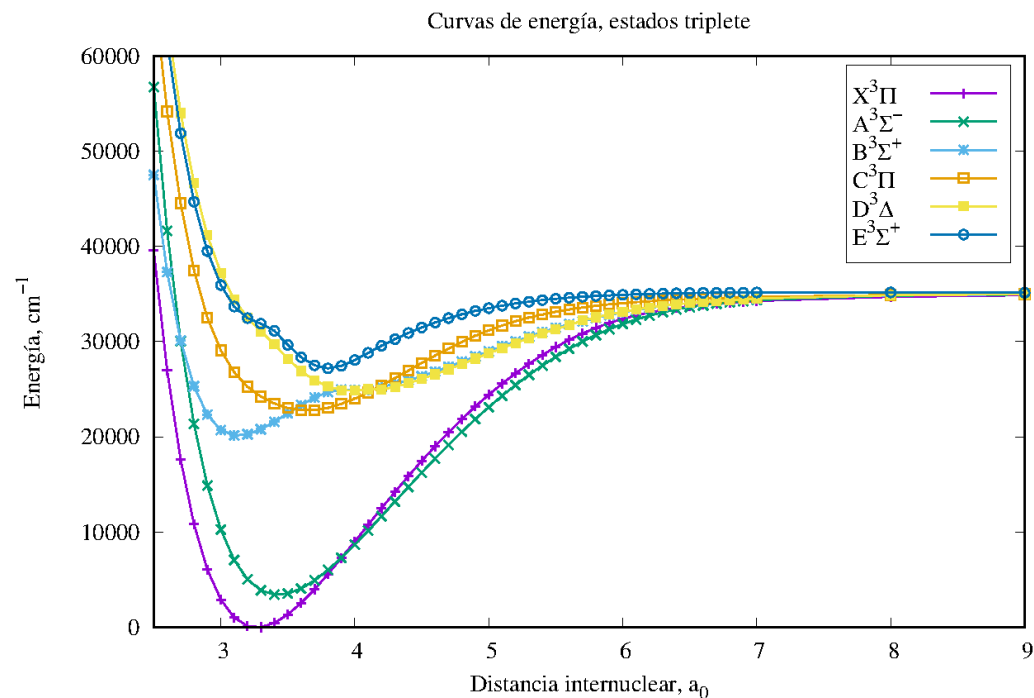
Temario

- **Introducción a los métodos de cálculo de la estructura molecular.**
- **Estudios conformacionales.**
- **Análisis de la densidad electrónica.**
- **Aplicaciones a la espectroscopia.**
- **Aplicaciones al estudio de las propiedades termodinámicas.**
- **Aplicaciones a la reactividad química.**
- **Modelización de macromoléculas y biomoléculas.**

Introducción a los métodos de cálculo de la estructura molecular.

- Se hará un estudio de los métodos de cálculo de la estructura electrónica, aplicándolo al cálculo de curvas de energía potencial de moléculas diatómicas.

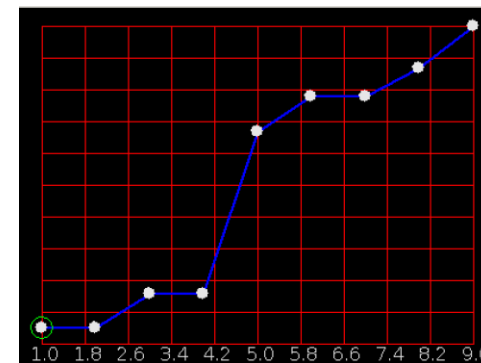
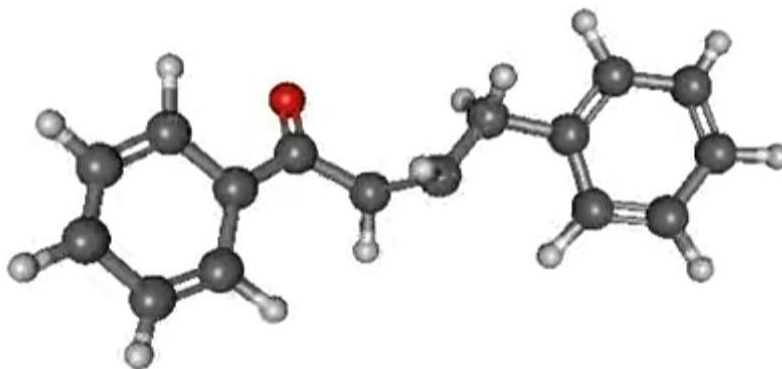
Como ejemplo, en el dibujo se representan las curvas de energía potencial de los estados triplete de la molécula SiC (TFG 20/21, Ana Pose)



Estudios conformacionales.

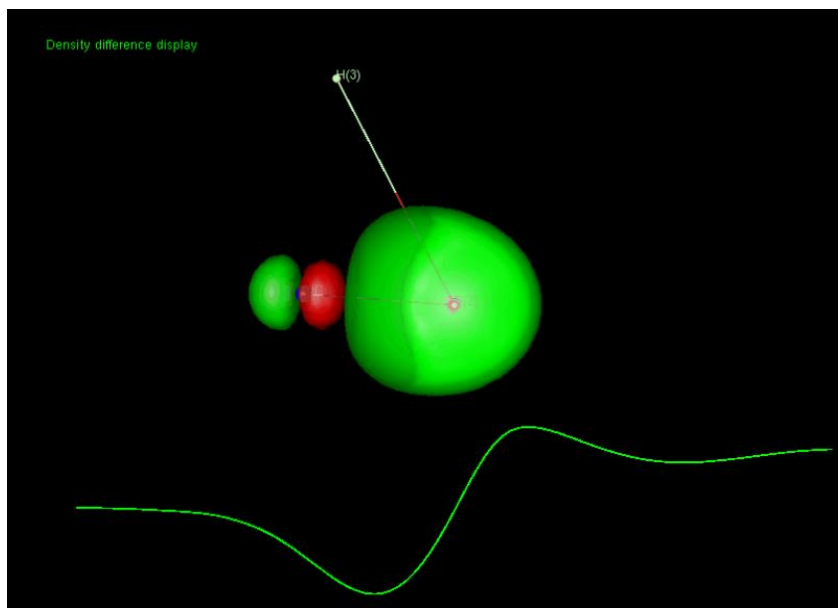
- Se analizarán las distintas conformaciones utilizando métodos de dinámica clásica combinados con potenciales de mecánica molecular.

<https://youtu.be/QDvyCI5Y6T4>



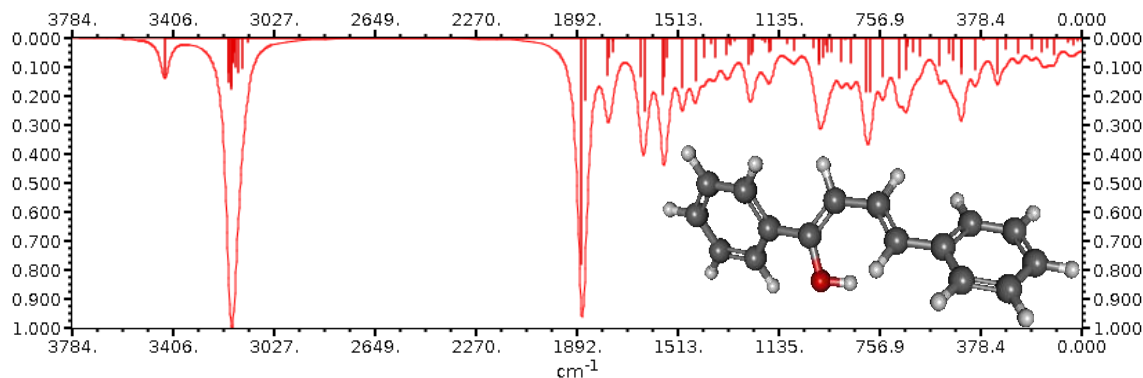
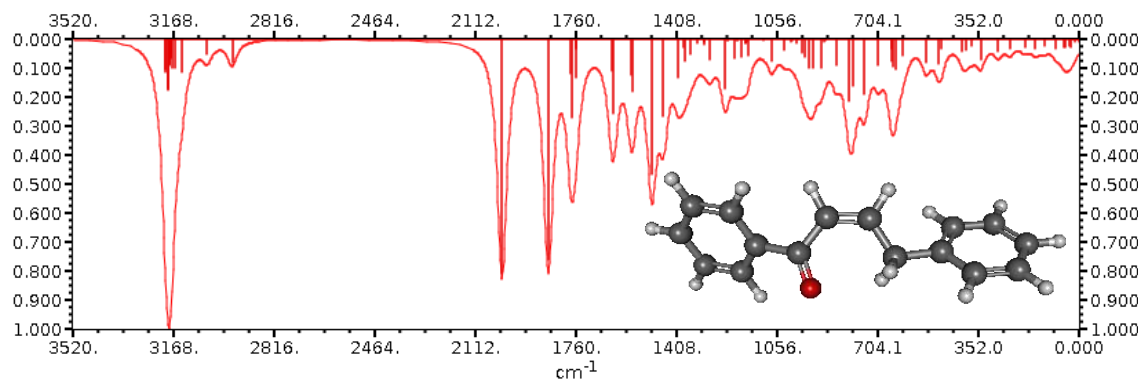
Análisis de la densidad electrónica.

- El análisis de la densidad permite estudiar la reactividad.
- En el ejemplo se estudia la variación de la diferencia de densidad a lo largo del camino de mínima energía de una reacción.
- Más información en www.qfa.uam.es/QC



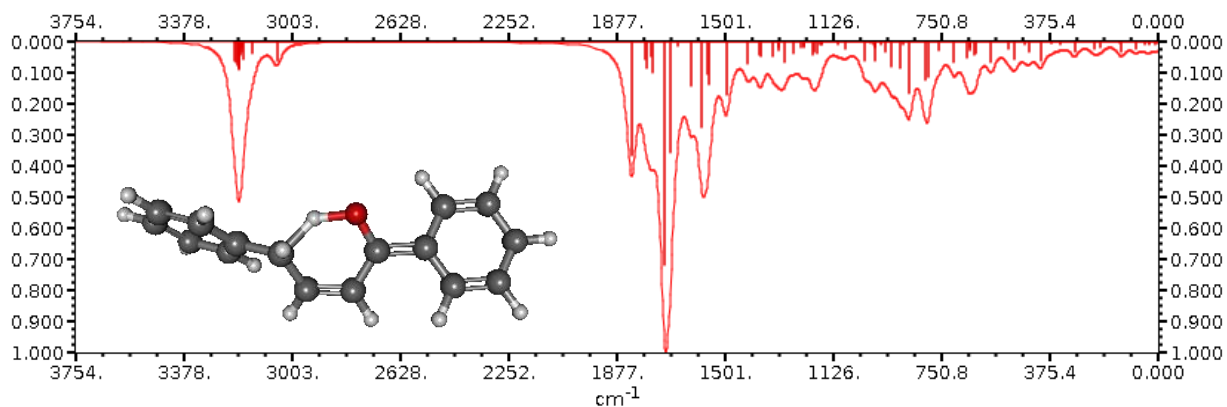
Aplicaciones a la espectroscopia

- Se realizarán simulaciones de espectros, muy importantes si queremos comparar con datos experimentales. Por ejemplo para distinguir especies ceto y enol:



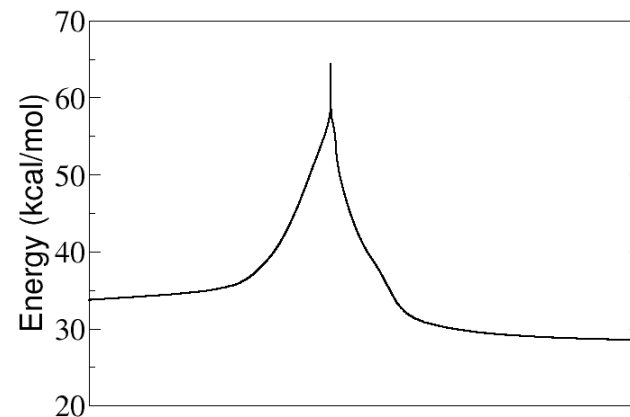
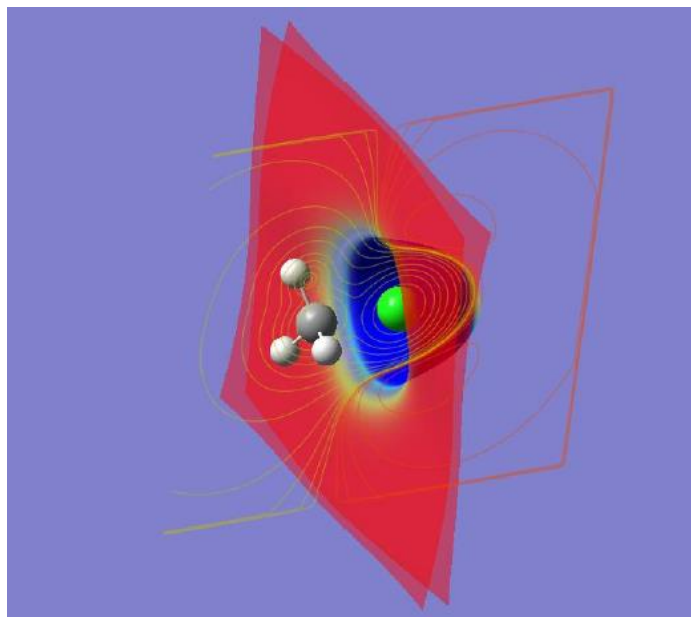
Aplicaciones al estudio de las propiedades termodinámicas

- Se estudiará una reacción química calculando las energías libres de reactivos y productos junto con su proporción en el equilibrio. Además se evaluará el estado de transición con su frecuencia imaginaria.



Aplicaciones a la reactividad química.

- Se evaluará el camino de mínima energía y las constantes cinéticas, además de la cinética del proceso
- Cálculo del potencial electrostático molecular y su relación con la reactividad



UAM



FACULTAD DE
CIENCIAS

Química Computacional

Más información:

Cristina Sanz-Sanz/Ignacio Ema

Departamento de Química Física Aplicada

Facultad de Ciencias

Tfno: 914973922/4785

E-mail: cristina.sanz@uam.es
nacho.ema@uam.es

Más información:

Antonio Picón

Departamento de Química

Facultad de Ciencias

Tfno: 914973360

E-mail: antonio.picon@uam.es

Visita la página <http://www.qfa.uam.es/QC>

excelencia Campus Internacional UAM
CSIC+

www.uam.es

