



UNIVERSIDAD DE CÓRDOBA

CÓDIGO:
FDOC-088
VERSIÓN: 02
EMISIÓN:
22/03/2019
PÁGINA
1 DE 7

PLAN DE CURSO

1. INFORMACIÓN BÁSICA

1.1. Facultad	Ciencias Básicas	1.2. Programa	Química		
1.3. Área		1.4. Curso	Electiva Química Computacional II		
1.5. Código	EP402182	1.6. Créditos	3		
1.6.1. HDD	54	1.6.2. HTI	108	1.7. Año de actualización	2020

2. JUSTIFICACIÓN

El conocimiento y manejo de la Química Computacional como electiva de profundización, es indispensable para todo estudiante del programa de Química, donde, la química computacional es una herramienta complementaria para las diferentes sub-disciplinas del área de la química y otras áreas a fines. Su principal importancia radica en la sustitución de algunos datos experimentales y su buena aproximación a los valores reales. Este campo de la química tiene un gran impacto en el estudio de reacciones químicas, predicción de propiedades, síntesis y caracterización de compuestos, que de alguna u otra forma han contribuido con el desarrollo de materiales, fármacos, etc., que conllevan a una mejor calidad de vida.

Esta electiva entrega a los estudiantes conceptos y aplicaciones concretas de la química computacional en aspectos relacionados con el diseño, caracterización y evaluación de propiedades químicas, fisicoquímicas, espectroscópicas, etc., asistidas por computador de diferentes sistemas químicos.

La electiva química computacional como parte de las ciencias, le proporciona al estudiante una cobertura concisa y con autoridad de los principios de la química que servirán como eje para el desarrollo concienzudo, sistemático y práctico de las ciencias básicas en la investigación.

Es indudable, que la utilización masiva de las TICs ha transformado la actividad científica y educativa de la sociedad, convirtiendo a la química computacional en una herramienta complementaria e indispensable en las diferentes investigaciones científicas.

Actualmente existe un interés creciente, en los grupos de investigación y en diferentes industrias por adquirir, desarrollar e implementar técnicas y herramientas suministradas por el área de la química computacional. Esta electiva busca incentivar el interés por esta importante disciplina, al ofrecer a los estudiantes e investigadores del programa de Química de la Universidad de Córdoba, un conjunto de técnicas y herramientas contemporáneas con aplicaciones en el área de química y la investigación.



3. PROPÓSITOS DE FORMACIÓN

Orientar al estudiante del Programa de Química hacia la apropiación del conocimiento de la materia microscópica teniendo en cuenta la perspectiva electrónica, estructural y reactividad de las partículas fundamentales, mediante la electiva de Química Computacional y de esta forma, complementar una investigación científica.

4. COMPETENCIAS

4.1. Específicas

- Comprender los conceptos y principios básicos de la química computacional.
- Manejar las diferentes herramientas informáticas para el desarrollo de la química computacional.
- Modelar sistemas químicos teniendo en cuenta la investigación realizada.
- Analizar e interpretar propiedades químicas de los cálculos computacionales.
- Simular y predecir propiedades químicas en una investigación específica.

4.2. Transversales

- Asociar la interdisciplinariedad de la química computacional con las diferentes ramas de la química y las áreas afines, tales como, la química orgánica, química analítica, fisicoquímica, química inorgánica, productos naturales, ciencia y diseño de materiales, etc.
- Complementar su propuesta y/o trabajo de investigación independientemente del grupo o semillero de investigación al cual pertenezca.

5. CONTENIDOS

- No. 1. Introducción a la Química Computacional
- No. 2. Generalidades: Métodos de Mecánica Molecular, Ab Initio, DFT, Semi-Empíricos, Dinámica Molecular.
- No. 3. Introducción a GaussView y Gaussian 03
- No. 4. Diseño de entradas. Matriz Z. Cálculos de energía a punto simple.



No. 5. Optimizaciones – Propiedades Geométricas

No. 6. Cálculos de Frecuencia

No. 7. Selección de un Método Teórico

No. 8. Orbitales Moleculares Frontera

No. 9. Mapas de Superficie Electroestático

No. 10. Análisis Poblacional

No. 11. Termoquímica

No. 12. Estados Excitados

6. ESTRATEGIAS METODOLÓGICAS

La metodología de la asignatura combina las clases teóricas impartidas mediante lección magistral, con las clases prácticas con ordenador y software necesarios en las salas de informática de la Universidad de Córdoba.

El desarrollo del curso se divide en dos formas de trabajo como son el trabajo independiente y la mediación presencial por parte del docente, así:

- **Trabajo independiente:** Principalmente, el estudiante revisa los documentos de apoyo, centrándose en lecturas y consultas solicitadas por el docente, realización de talleres y cuestionarios, participación en foros, videoclases, chats, elaboración de informes y/o presentaciones, revisiones bibliográficas y otros.
- **Mediación presencial:** La docencia directa se fundamenta principalmente en presentaciones magistrales donde el estudiante participa activamente. Además, se realizarán actividades, talleres, quices, parciales y prácticas virtuales.

**PLAN DE CURSO**

7. ACTIVIDADES Y PRÁCTICAS

SEMANA	COMPETENCIA	FUNDAMENTACION CONCEPTUAL			
		DOCENCIA DIRECTA	TIEMPO	TRABAJO INDEPENDIENTE	TIEMPO
1	Reconoce la importancia de la Química computacional como herramienta de investigación.	Introducción a la química computacional.	3	Influencia de la química computacional en la investigación científica.	6
2	Asimila la representación matemática de las especies químicas	Modelos Químicos y funciones de Base	3	Lecturas complementarias: Como elegir el Modelo químico apropiado.	6
3	Conceptualiza la teoría básica asociada a los diferentes métodos utilizados en la Química Computacional.	Generalidades: Métodos de Mecánica Molecular, Ab Initio, Semi-Empíricos, DFT, Dinámica Molecular.	3	Investigación: Aplicaciones, Consideraciones prácticas y Limitaciones de los diferentes Métodos utilizados en Química Computacional.	6
4	Diseña estructuras con Gauss View y determina parámetros geométricos iniciales.	Introducción a Gauss View y Gaussian 03	3	Taller: Diseñar estructuras moleculares y determinación de parámetros geométricos. Aplicaciones de Gaussian.	6
5	Construye archivos de entrada. Corre cálculos en Gaussian. Interpreta archivos de salida.	Diseño de Entradas. Matriz Z. Cálculos de energía a punto simple	3	Taller: Construir archivos de entrada y realización de cálculos de energía a punto simple.	6
6		Primera Evaluación Acumulativa	3		6
7	Realiza cálculos de optimización utilizando diferentes modelos químicos. Determina propiedades geométricas	Optimización Geométrica	3	Taller: Realización de cálculos de optimización utilizando diferentes modelos químicos.	6
8	Realiza cálculos de frecuencia. Visualiza e interpreta espectros.	Cálculos de Frecuencia	3	Taller: Realización de cálculos de frecuencia, visualización e interpretación de espectros.	6



UNIVERSIDAD DE CÓRDOBA

CÓDIGO:
FDOC-088
VERSIÓN: 02
EMISIÓN:
22/03/2019
PÁGINA
5 DE 7

PLAN DE CURSO

9	Conceptualiza la importancia del recurso computacional en una investigación.	Selección de un Método Teórico I	3	Investigación: Recursos computacionales vs precisión. Taller: Utilización sistemática de los métodos computacionales.	6
10	Conceptualiza la importancia del recurso computacional en una investigación.	Selección de un Método Teórico II	3	Investigación: Utilización de los recursos bibliográficos en la investigación científica.	6
11	Calcula orbitales moleculares, los visualiza e interpreta.	Orbitales Moleculares Frontera.	3	Taller: Realización de cálculos para determinar orbitales moleculares, visualización e interpretación.	6
12		Segunda Evaluación Acumulativa	3		6
13	Calcula, visualiza e interpreta mapas de superficie electrostático.	Mapas de superficie electrostático.	3	Taller: Realización de cálculos para determinar mapas de superficie electrostático	6
14	Realiza cálculos para determinar poblaciones electrónicas.	Análisis Poblacional.	3	Taller: Realización de cálculos para determinar poblaciones electrónicas.	6
15	Realiza cálculos para la determinación de propiedades termoquímicas.	Termoquímica	3	Taller: Realización de cálculos para determinar propiedades termoquímicas.	6
16	Realiza cálculos para la determinación de propiedades moleculares de especies químicas excitadas.	Estados Excitados	3	Investigación: Aplicaciones de los cálculos de moléculas excitadas en la investigación. Taller: Realización de cálculos para determinar propiedades moleculares de los estados excitados..	6
17	Interpreta y analiza resultados presentados en artículos relacionados con la química computacional.	Presentación y compilación de propiedades evaluadas computacionalmente.	3	Presentación de seminario.	6

Si usted ha accedido a este formato a través de un medio diferente al sitio

<http://www.unicordoba.edu.co/index.php/documentos-sigec/documentos-calidad> asegúrese que ésta es la versión vigente



UNIVERSIDAD DE CÓRDOBA

CÓDIGO:
FDOC-088
VERSIÓN: 02
EMISIÓN:
22/03/2019
PÁGINA
6 DE 7

PLAN DE CURSO

18		Tercera Evaluación Acumulativa	3		6
TOTAL			54		108

8. CRITERIOS DE EVALUACIÓN PARA EL DESARROLLO DE COMPETENCIAS

La evaluación en un proceso continuo, al estudiante se le proponen trabajos semanalmente, los cuales consisten en pequeños talleres que se deben desarrollar, argumentar y presentar al finalizar las clases, donde ratifica los conocimientos adquiridos en clase.

Por ser una electiva teórico-práctica se evaluará cada componente y con la ponderación que el docente considere se obtendrá la nota definitiva. Los criterios a evaluar son los siguientes:

Evaluaciones acumulativas.

Evaluaciones cortas (Quices).

Talleres o cuestionario

Asistencia y desempeño en clase (teoría - práctica)

Informes y seminarios

Otros criterios a consideración del profesor.

Se obtendrán tres notas parciales en el semestre. La nota definitiva de un parcial corresponde a la sumatoria ponderada de los criterios tomados en pleno acuerdo con los estudiantes. La nota definitiva es la media obtenida de los tres parciales.

9. BIBLIOGRAFÍA

1. Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods. 2nd Ed. James B. Foresman, Aileen Frisch. Gaussian Inc., 1996.

2. Gaussian98 User's Reference, Michael Frisch, Aileen Frisch and James B. Foresman. Gaussian Inc., 1998.

3. Introduction to Computational Chemistry. 3rd Ed. F. Jensen, Wiley & Sons, 2017.



PLAN DE CURSO

4. Essentials of Computational Chemistry. Theories and Models, C. J. Cramer, Wiley & Sons, 2002.
5. Computational Chemistry: A Practical Guide for Applying Techniques to Real-World Problems, D. C. Young, 2001.
6. Modern Quantum Chemistry. Introduction to Advanced Electronic Structure Theory. Szabo & Ostlund, McGraw-Hill, 1990.
7. Ab Initio Molecular Orbital Theory; Hehre, W. J.; Radom, L.; Schleyer, P.v.R.; Pople, J.A. Wiley-New York, 1986.
8. Experiments in Computational Organic Chemistry, Hehre, W. J.; Burke, L. D.; Shusterman, A. J.; Pietro, W. J.; Wavefunction, Inc, 1993.
9. Current Status of Transition-State Theory, Truhlar, D. G.; Garret, B. C.; Klippenstein, S. J., J. Phys. Chem., 100 (1996) 12771.
10. A Chemist's Guide to Density Functional Theory, W. Koch, M. C. Holthausen, Wiley-VCH, 2001.
11. Introducción a la Química Computacional, G. Cuevas, F.Cortes, FCE-México, 2003.
12. Gaussian03 (versión para Linux Computacional), GaussView para Linux (visualización gráfica).