CÁLCULO COMPUTACIONAL DE ESTRUCTURAS MOLECULARES (2017-18)

DATOS GENERALES

Código 35833

Créditos ECTS 3

Departamentos y áreas

Departamento	Área	Dpt. Resp.	Dpt. Acta
QUIMICA FISICA	QUIMICA FISICA	SÍ	SÍ

Estudios en que se imparte

MÁSTER UNIVERSITARIO EN CIENCIA DE MATERIALES

DOCTORADO EN CIENCIA DE MATERIALES

Contexto de la asignatura

Es una asignatura de la Facultad de Ciencias Químicas de la Universidad de Alicante.
Está adscrita al programa CIENCIAS DE MATERIALES, como asignatura fundamental-optativa de tres créditos (35833).

El objetivo fundamental es poner en contacto al alumno de doctorado con los métodos y ténicas más utilizados en el cálculo teórico de la estructura molecular.

OBJETIVOS

Objetivos específicos aportados por el profesorado (2017-18)

Se pretende que el alumnado sea capaz de elegir y aplicar los diversos métodos teóricos existentes, para la resolución de sus problemas concretos.

Para ello deben adquirir los conocimientos necesarios que les permita tener un criterio propio para utilizar la metodología más apropiada a cada problema, con la mejor precisión posible, y de forma que los cálculos a realizar sean viables y sus resultados resulten útiles.

CONTENIDOS

Contenidos teóricos y prácticos (2017-18)

- Fundamentos de la Química Computacional

o Introducción o La Mecánica Cuántica.
o La aproximación de Born-Oppenheimer
o El método Hartree-Fock
+ Método SCF y aproximación L.C.A.O. (C.L.O.A.).
+ Ventajas, inconvenientes y soluciones.
o Funciones de base
o Funciones de onda multideterminantales
+ Interacción de Configuraciones
+ Métodos Perturbativos o perturbacionales
o Coupled Clusters o Clusters acoplados (CC)
o Métodos multi-configuracionales
o Los métodos del Funcional Densidad
+ Funcionales
+ Derivada Funcional
+ Matrices Densidad Reducidas y Densidad Electrónica
+ El Teorema de Hohenberg y Kohn
+ Método de Kohn y Sham
El Funcional de Intercambio y Correlación
+ Las Ecuaciones de Kohn y Sham
+ Método de Kohn y Sham con Intercambio Exacto
+ Aproximación Perturbativa
o Métodos semiempíricos

- Mecánica Molecular. o Introducción.

o Amber
+ Descripción

- Aplicaciones de la Química Computacional

o Tipos y métodos de cálculos
+ Métodos clásicos
+ Métodos del Funcional Densidad
+ Los procedimientos G1 y G2 (y G3) [12,2,1]
+ Métodos Semiempíricos
+ Otros tipos de cáculos
o Introducción de datos.
+ Ruta

o Análisis de los ficheros de salida

- Herramientas gráficas

o Molden
o Molekel
o ghemical
o Gabedit
o JMol
o xmgr, GRACE
o gnuplot

- Ejercicios
- Comandos UNIX de uso frecuente
- Notas sobre el editor vi, vim,gvim o Comandos "vi" ("vim") de uso frecuente

EVALUACIÓN

Instrumentos y criterios de Evaluación 2017-18

Una parte importante de la evaluación es el interés mostrado por el alumno, así como la correcta ejecución de todas las prácticas, informes y pruebas que se realizen.

Si no se aprueba en la primera convocatoria, se realizará un examen en la segunda convocatoria para las actividades recuperables.

Tipo	Criterio	Descripción	Ponderación
EXAMEN FINAL	Se realizará un informe con las prácticas realizadas, sus resultados y discusión de ellos. También se valorará su presentación. Esta actividad es recuperable en el examen de la convocatoria extraordinara.	Informe de los ejercicios propuestos	50
ACTIVIDADES DE EVALUACIÓN DURANTE EL SEMESTRE	A partir de un problema en el que esté interesado el alumno, se presentará un informe, en el que se propondrá la forma de estudiarlo, indicando los métodos a utilizar, y si es posible su ejecución, mostrando los resultados. Esta actividad es recuperable en el examen de la convocatoria extraordinaria.	Propuesta de su interés	20
ACTIVIDADES DE EVALUACIÓN DURANTE EL SEMESTRE	Se evaluará el interés y la participación, así como la capacidad de situar la asignatura en el contexto del Máster en Ciencia de Materiales. Esta actividad no es recuperable.	Interés y participación	30