| | |
|---|---|
| **FACULTAD:** Ciencias Básicas | |
| **PROGRAMA:** Química | |
| **DEPARTAMENTO DE:** Química | |
| **CURSO:** Química Computacional | **CÓDIGO:** 156300 |
| **ÁREA:** Formación profesional — Banco de Electivas Profesionales | |
| **REQUISITOS:** Fisicoquímica (química cuántica); se recomienda haber cursado Programación I [propuesto — confirmar con el plan de estudios] | **CORREQUISITO:** Ninguno |
| **CRÉDITOS:** 2 (96 h semestrales: 48 h de contacto directo y 48 h de trabajo independiente) | **TIPO DE CURSO:** Teórico-práctico |
| **FECHA ÚLTIMA ACTUALIZACIÓN:** Octubre de 2026 | |

## JUSTIFICACIÓN

La química computacional permite predecir estructuras, energías, espectros, propiedades termodinámicas y mecanismos de reacción a partir de los principios de la mecánica cuántica y de la mecánica estadística. Hoy es una herramienta complementaria del experimento en síntesis, catálisis, ciencia de materiales, diseño de fármacos y química ambiental, y su uso responsable requiere comprender los modelos, sus aproximaciones y sus límites.

La asignatura ofrece al estudiante los fundamentos de la mecánica molecular, los métodos de estructura electrónica (Hartree–Fock, métodos correlacionados y teoría del funcional de la densidad) y la dinámica molecular, con trabajo práctico en software de código abierto, de modo que pueda plantear, ejecutar e interpretar críticamente cálculos sencillos de interés químico.

## OBJETIVO GENERAL

Comprender los fundamentos teóricos de los principales métodos de la química computacional y aplicarlos, con software de uso libre, a la predicción e interpretación de estructuras, energías, propiedades espectroscópicas y reactividad de sistemas moleculares.

## OBJETIVOS ESPECÍFICOS

1. Explicar el concepto de superficie de energía potencial y los métodos de optimización de geometrías y búsqueda de estados de transición.
2. Aplicar campos de fuerza de mecánica molecular al análisis conformacional.
3. Describir los fundamentos del método Hartree–Fock, de los conjuntos de base y de los métodos post-Hartree–Fock y DFT.
4. Calcular e interpretar propiedades moleculares: frecuencias vibracionales, termoquímica, orbitales, cargas y espectros.
5. Ejecutar simulaciones sencillas de dinámica molecular y evaluar críticamente la calidad de los resultados frente a datos experimentales.

| **COMPETENCIAS** |
|---|
| • Selecciona el nivel de teoría y el conjunto de base adecuados según el problema y los recursos disponibles.<br>• Prepara, ejecuta y analiza cálculos de estructura electrónica y simulaciones con software libre.<br>• Interpreta resultados computacionales con criterio fisicoquímico y los contrasta con el experimento.<br>• Comunica resultados con rigor y consulta documentación y literatura en inglés. |

| **UNIDAD 1. Superficie de energía potencial y mecánica molecular** | | |
|---|---|---|
| **TEMA** | **HORAS DE CONTACTO DIRECTO** | **HORAS DE TRABAJO INDEPENDIENTE DEL ESTUDIANTE** |
| 1.1 Panorama de la química computacional; aproximación de Born–Oppenheimer; superficie de energía potencial | 3 | 3 |
| 1.2 Coordenadas, matriz Z y construcción de moléculas; formatos de archivos | 3 | 3 |
| 1.3 Campos de fuerza: términos de enlace, ángulo, torsión, van der Waals y electrostáticos | 3 | 3 |
| 1.4 Optimización de geometría; mínimos, puntos de silla; análisis conformacional | 3 | 3 |
| **Subtotal unidad** | **12** | **12** |

| **UNIDAD 2. Métodos de estructura electrónica** | | |
|---|---|---|
| **TEMA** | **HORAS DE CONTACTO DIRECTO** | **HORAS DE TRABAJO INDEPENDIENTE DEL ESTUDIANTE** |
| 2.1 Ecuación de Schrödinger electrónica; determinante de Slater; método Hartree–Fock y SCF | 3 | 3 |
| 2.2 Conjuntos de base: STO, GTO, Pople, Dunning; error de superposición de base | 3 | 3 |
| 2.3 Correlación electrónica: MP2 y coupled cluster (visión general) | 3 | 3 |
| 2.4 Teoría del funcional de la densidad: teoremas de Hohenberg–Kohn, Kohn–Sham, funcionales y dispersión | 3 | 3 |
| **Subtotal unidad** | **12** | **12** |

| **UNIDAD 3. Propiedades moleculares y reactividad** | | |
|---|---|---|
| **TEMA** | **HORAS DE CONTACTO DIRECTO** | **HORAS DE TRABAJO INDEPENDIENTE DEL ESTUDIANTE** |

| | | |
|---|---|---|
| 3.1 Frecuencias vibracionales, factores de escala y termoquímica (ZPE, entalpía, energía libre) | 3 | 3 |
| 3.2 Orbitales moleculares, HOMO–LUMO, cargas atómicas y potencial electrostático | 3 | 3 |
| 3.3 Estados de transición, coordenada intrínseca de reacción (IRC) y barreras de activación | 3 | 3 |
| 3.4 Modelos de solvatación implícita; espectros UV-Vis por TD-DFT | 3 | 3 |
| **Subtotal unidad** | **12** | **12** |

| **UNIDAD 4. Dinámica molecular y aplicaciones** | | |
|---|---|---|
| **TEMA** | **HORAS DE CONTACTO DIRECTO** | **HORAS DE TRABAJO INDEPENDIENTE DEL ESTUDIANTE** |
| 4.1 Fundamentos de dinámica molecular: integración de ecuaciones de movimiento, ensambles, termostatos | 3 | 3 |
| 4.2 Condiciones periódicas, interacciones de largo alcance y análisis de trayectorias | 3 | 3 |
| 4.3 Aplicaciones: docking molecular y diseño de fármacos; materiales y catálisis | 3 | 3 |
| 4.4 Proyecto integrador: estudio computacional de un sistema químico; reproducibilidad | 3 | 3 |
| **Subtotal unidad** | **12** | **12** |

| | | |
|---|---|---|
| **TOTAL DEL CURSO** | **48** | **48** |

**METODOLOGÍA (Debe evidenciarse el empleo de nuevas tecnologías de apoyo a la enseñanza y al aprendizaje)**

El curso se desarrolla con clases magistrales participativas, aprendizaje basado en problemas (ABP) y trabajo práctico (laboratorio, simulación o cómputo, según el tema). El trabajo independiente se orienta con guías por unidad y se acompaña en horario de asesoría y a través del aula virtual institucional.

Uso de nuevas tecnologías de apoyo a la enseñanza y al aprendizaje:

- Aula virtual institucional (plataforma de la Universidad de Pamplona) para publicación de guías, entrega de productos, foros de discusión y cuestionarios automatizados.
- Bases de datos bibliográficas suscritas por la Universidad y repositorios de acceso abierto para la búsqueda y lectura de artículos científicos en inglés.
- Software de código abierto o de licencia académica gratuita: Avogadro (construcción y visualización), Psi4 y ORCA (estructura electrónica), Python/Jupyter para el análisis de resultados.
- Bases de datos en línea: NIST CCCBDB, PubChem y Protein Data Bank (RCSB PDB).
- Herramientas colaborativas en línea para la elaboración de informes y presentaciones, y videoconferencia para asesorías del trabajo independiente.

## SISTEMA DE EVALUACIÓN

La evaluación es continua, formativa y sumativa. Se combina la valoración del trabajo en el aula (contacto directo) con la del trabajo independiente, el cual se evalúa mediante los productos indicados en cada unidad (informes, talleres, cuestionarios de lectura en inglés y proyecto).

| Componente | Peso |
|---|---|
| Primer corte (Unidades 1–2): examen escrito, talleres y control de lectura en inglés | 35 % |
| Segundo corte (Unidades 3–4): examen escrito, informes de práctica y control de lectura en inglés | 35 % |
| Examen final: proyecto integrador con informe escrito y sustentación oral | 30 % |

*Distribución propuesta según la estructura habitual de cortes (35 % – 35 % – 30 %); ajustar a lo dispuesto en el Reglamento Académico Estudiantil de Pregrado vigente.*

## BIBLIOGRAFÍA DISPONIBLE EN UNIDAD DE RECURSOS BIBLIOGRÁFICOS DE LA UNIVERSIDAD DE PAMPLONA

[1] Cramer, C. J. (2004). *Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models* (2.ª ed.). Wiley.

[2] Jensen, F. (2017). *Introduction to Computational Chemistry* (3.ª ed.). Wiley.

[3] Leach, A. R. (2001). *Molecular Modelling: Principles and Applications* (2.ª ed.). Prentice Hall.

*Existencia y ejemplares por confirmar en el catálogo institucional (https://aplicaciones.unipamplona.edu.co/prestamo/) y en las bases de datos suscritas (https://login.unipamplona.basesdedatosezproxy.com/login).*

## BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

[4] Koch, W. y Holthausen, M. C. (2001). *A Chemist's Guide to Density Functional Theory* (2.ª ed.). Wiley-VCH.

[5] Lewars, E. G. (2024). *Computational Chemistry: Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics* (4.ª ed.). Springer.

[6] Szabo, A. y Ostlund, N. S. (1996). *Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory*. Dover.

## DIRECCIONES ELECTRÓNICAS DE APOYO AL CURSO

- NIST Computational Chemistry Comparison and Benchmark Database (CCCBDB): https://cccbdb.nist.gov
- Psi4: https://psicode.org
- ORCA (FACCTs): https://www.faccts.de/orca
- Avogadro: https://avogadro.cc
- RCSB Protein Data Bank: https://www.rcsb.org
- WebMO (interfaz web para química computacional): https://webmo.net

**NOTA: EN CADA UNA DE LAS UNIDADES EL DOCENTE DEBERÁ PROPONER MÍNIMO UNA LECTURA EN LENGUA INGLESA Y SU MECANISMO DE CONTROL (ver tablas de unidad).**

| | |
|---|---|
| **UNIDAD No.** | 1 |
| **NOMBRE DE LA UNIDAD** | Superficie de energía potencial y mecánica molecular |
| **COMPETENCIAS A DESARROLLAR** | Explica la superficie de energía potencial y aplica campos de fuerza al análisis conformacional. |

| CONTENIDOS | ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL PROFESOR | HORAS CONTACTO DIRECTO | ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL ESTUDIANTE | HORAS TRABAJO INDEPENDIENTE | HORAS ACOMPAÑAMIENTO AL TRABAJO INDEPENDIENTE | ESTRATEGIAS DE EVALUACIÓN QUE INCLUYA LA EVALUACIÓN DEL TRABAJO INDEPENDIENTE |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 1.1 Panorama de la química computacional; aproximación de Born–Oppenheimer; superficie de energía potencial | Clase magistral; presentación del curso. | 3 | Lectura previa y mapa conceptual de métodos. | 3 | 1 | Mapa conceptual. |
| 1.2 Coordenadas, matriz Z y construcción de moléculas; formatos de archivos | Taller en sala de cómputo con Avogadro. | 3 | Construcción de moléculas y archivos de entrada. | 3 | 1 | Producto entregable. |
| 1.3 Campos de fuerza: términos de enlace, ángulo, torsión, van der Waals y electrostáticos | Clase magistral con ejemplos. | 3 | Comparación de energías conformacionales con dos campos de fuerza. | 3 | 1 | Taller evaluado. |
| 1.4 Optimización de geometría; mínimos, puntos de silla; análisis conformacional | Demostración de barrido de ángulos diedros. | 3 | Barrido conformacional del butano o del etanol; lectura en inglés. | 3 | 1 | Informe con gráfica de energía vs. ángulo; control de lectura. |
| | **TOTAL UNIDAD** | **12** | | **12** | **4** | |

| | |
|---|---|
| **LECTURA EN LENGUA INGLESA Y MECANISMO DE CONTROL** | Lectura del capítulo sobre campos de fuerza en Jensen (2017), *Introduction to Computational Chemistry*. Control: cuestionario en el aula virtual. |

**NOTA: EN CADA UNIDAD EL DOCENTE DEBE DILIGENCIAR LA ANTERIOR TABLA**

| | |
|---|---|
| **UNIDAD No.** | 2 |
| **NOMBRE DE LA UNIDAD** | Métodos de estructura electrónica |
| **COMPETENCIAS A DESARROLLAR** | Comprende los fundamentos de Hartree–Fock, conjuntos de base, métodos correlacionados y DFT, y selecciona el nivel de teoría adecuado. |

| CONTENIDOS | ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL PROFESOR | HORAS CONTACTO DIRECTO | ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL ESTUDIANTE | HORAS TRABAJO INDEPENDIENTE | HORAS ACOMPAÑAMIENTO AL TRABAJO INDEPENDIENTE | ESTRATEGIAS DE EVALUACIÓN QUE INCLUYA LA EVALUACIÓN DEL TRABAJO INDEPENDIENTE |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 2.1 Ecuación de Schrödinger electrónica; determinante de Slater; método Hartree–Fock y SCF | Clase magistral. | 3 | Ejercicios conceptuales; cálculo HF sencillo. | 3 | 1 | Quiz escrito. |
| 2.2 Conjuntos de base: STO, GTO, Pople, Dunning; error de superposición de base | Clase con estudio de convergencia. | 3 | Convergencia de energía con el tamaño de la base. | 3 | 1 | Informe con tabla y gráfica. |
| 2.3 Correlación electrónica: MP2 y coupled cluster (visión general) | Clase magistral. | 3 | Comparación HF/MP2 para energías de reacción. | 3 | 1 | Taller evaluado. |
| 2.4 Teoría del funcional de la densidad: teoremas de Hohenberg–Kohn, Kohn–Sham, funcionales y dispersión | Clase magistral y demostración con Psi4/ORCA. | 3 | Cálculos DFT con distintos funcionales. | 3 | 1 | Informe; primer parcial. |
| | **TOTAL UNIDAD** | **12** | | **12** | **4** | |
| **LECTURA EN LENGUA INGLESA Y MECANISMO DE CONTROL** | Lectura del capítulo sobre el método Hartree–Fock en Szabo y Ostlund (1996), *Modern Quantum Chemistry*, o en Cramer (2004). Control: resumen estructurado y preguntas en clase. | | | | | |

**NOTA: EN CADA UNIDAD EL DOCENTE DEBE DILIGENCIAR LA ANTERIOR TABLA**

| | |
|---|---|
| **UNIDAD No.** | 3 |
| **NOMBRE DE LA UNIDAD** | Propiedades moleculares y reactividad |
| **COMPETENCIAS A DESARROLLAR** | Calcula e interpreta propiedades moleculares, espectros y perfiles de reacción. |

| CONTENIDOS | ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL PROFESOR | HORAS CONTACTO DIRECTO | ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL ESTUDIANTE | HORAS TRABAJO INDEPENDIENTE | HORAS ACOMPAÑAMIENTO AL TRABAJO INDEPENDIENTE | ESTRATEGIAS DE EVALUACIÓN QUE INCLUYA LA EVALUACIÓN DEL TRABAJO INDEPENDIENTE |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 3.1 Frecuencias vibracionales, factores de escala y termoquímica (ZPE, entalpía, energía libre) | Clase con comparación frente a datos experimentales (NIST CCCBDB). | 3 | Cálculo de frecuencias y comparación con el espectro IR experimental. | 3 | 1 | Informe evaluado. |

| | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 3.2 Orbitales moleculares, HOMO–LUMO, cargas atómicas y potencial electrostático | Demostración de visualización. | 3 | Análisis de reactividad de una serie de moléculas. | 3 | 1 | Producto entregable. |
| 3.3 Estados de transición, coordenada intrínseca de reacción (IRC) y barreras de activación | Ejemplo guiado de una reacción sencilla. | 3 | Localización de un estado de transición. | 3 | 1 | Taller evaluado. |
| 3.4 Modelos de solvatación implícita; espectros UV-Vis por TD-DFT | Clase magistral y demostración. | 3 | Cálculo de un espectro UV-Vis en solución; lectura en inglés. | 3 | 1 | Quiz; control de lectura. |
| | **TOTAL UNIDAD** | **12** | | **12** | **4** | |
| **LECTURA EN LENGUA INGLESA Y MECANISMO DE CONTROL** | Lectura del capítulo sobre propiedades moleculares en Cramer (2004), *Essentials of Computational Chemistry*. Control: cuestionario y aplicación en el informe. | | | | | |

**NOTA: EN CADA UNIDAD EL DOCENTE DEBE DILIGENCIAR LA ANTERIOR TABLA**

| | |
|---|---|
| **UNIDAD No.** | 4 |
| **NOMBRE DE LA UNIDAD** | Dinámica molecular y aplicaciones |
| **COMPETENCIAS A DESARROLLAR** | Ejecuta simulaciones sencillas de dinámica molecular y desarrolla un proyecto computacional con análisis crítico. |

| CONTENIDOS | ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL PROFESOR | HORAS CONTACTO DIRECTO | ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL ESTUDIANTE | HORAS TRABAJO INDEPENDIENTE | HORAS ACOMPAÑAMIENTO AL TRABAJO INDEPENDIENTE | ESTRATEGIAS DE EVALUACIÓN QUE INCLUYA LA EVALUACIÓN DEL TRABAJO INDEPENDIENTE |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 4.1 Fundamentos de dinámica molecular: integración de ecuaciones de movimiento, ensambles, termostatos | Clase magistral. | 3 | Implementación de un integrador de Verlet en Python para un sistema simple. | 3 | 1 | Programa entregado. |
| 4.2 Condiciones periódicas, interacciones de largo alcance y análisis de trayectorias | Demostración con software libre. | 3 | Análisis de una trayectoria (RMSD, función de distribución radial). | 3 | 1 | Informe con gráficas. |
| 4.3 Aplicaciones: docking molecular y diseño de fármacos; materiales y catálisis | Seminario guiado con bases de datos (PDB, PubChem). | 3 | Preparación de seminario por grupos. | 3 | 1 | Seminario oral. |

| | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 4.4 Proyecto integrador: estudio computacional de un sistema químico; reproducibilidad | Asesoría de proyectos. | 3 | Desarrollo del proyecto. | 3 | 1 | Informe y sustentación; segundo parcial. |
| | **TOTAL UNIDAD** | **12** | | **12** | **4** | |
| **LECTURA EN LENGUA INGLESA Y MECANISMO DE CONTROL** | Lectura del capítulo sobre dinámica molecular en Leach (2001), *Molecular Modelling: Principles and Applications*. Control: cuestionario y aplicación en el proyecto. | | | | | |

**NOTA: EN CADA UNIDAD EL DOCENTE DEBE DILIGENCIAR LA ANTERIOR TABLA**

**Elaboró: Prof. Eliseo Amado González, Universidad de Pamplona**