



| Guía docente          |   |                    |                               |          |
|-----------------------|---|--------------------|-------------------------------|----------|
| Datos Identificativos |   |                    |                               | 2015/16  |
| Asignatura (*)        | Modelización Molecular  | Código             | 610509006                     |          |
| Titulación            | Mestrado en Investigación Química e Química Industrial  |                    |                               |          |
| Descriptorios         |   |                    |                               |          |
| Ciclo                 | Periodo   | Curso              | Tipo                          | Créditos |
| Máster Oficial        | 1º cuatrimestre   | Primero            | Optativa                      | 3        |
| Idioma                | GallegoInglés   |                    |                               |          |
| Modalidad docente     | Presencial  |                    |                               |          |
| Prerrequisitos        |   |                    |                               |          |
| Departamento          | Química Fundamental   |                    |                               |          |
| Coordinador/a         |   | Correo electrónico |                               |          |
| Profesorado           | Platas Iglesias, Carlos   | Correo electrónico | carlos.platas.iglesias@udc.es |          |
| Web                   |   |                    |                               |          |
| Descripción general   | <p>2.1. Módulo al que pertenece la materia en el Plan de Estudios. Materias con las que se relaciona:<br/>Módulo de Estructura y Reactividad Química. Se relaciona fundamentalmente con las asignaturas de dicho módulo.</p> <p>2.2. Papel que juega este curso en ese bloque formativo y en el conjunto del Plan de Estudios:<br/>Es una asignatura orientada a instruir a los alumnos en el manejo básico de los programas de la química computacional. Su carácter es fundamentalmente práctico, limitándose a introducir los conceptos de Química Teórica más necesarios a un nivel básico.</p> |                    |                               |          |

| Competencias del título |  |
|-------------------------|--|
| Código                  | Competencias del título  |
| A1                      | Definir conceptos, principios, teorías y hechos especializados de las diferentes áreas de la Química   |
| A2                      | Proponer alternativas para la resolución de problemas químicos complejos de las diferentes especialidades químicas   |
| A4                      | Innovar en los métodos de síntesis y análisis químico relacionados con las diferentes áreas de la Química.   |
| A7                      | Operar con instrumentación avanzada para el análisis químico y la determinación estructural  |
| A9                      | Promover la innovación y el emprendimiento en la industria y en la investigación Química   |
| B2                      | Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio. |
| B7                      | Identificar información de la bibliografía utilizando los canales apropiados e integrar dicha información para plantear y contextualizar un tema de investigación.   |
| B10                     | Utilizar terminología científica en lengua inglesa para argumentar los resultados experimentales en el contexto de la profesión química  |
| B14                     | Demostrar una actitud de respeto hacia las opiniones, los valores, los comportamientos y prácticas de otros.   |

| Resultados de aprendizaje   |                         |     |
|---|-------------------------|-----|
| Resultados de aprendizaje   | Competencias del título |     |
| Adquirir conocimientos básicos sobre los métodos computacionales más usados en la actualidad.   | AM1                     |     |
| Saber seleccionar el método de cálculo más adecuado para un problema determinado teniendo en cuenta los recursos computacionales disponibles. | AM2                     |     |
| Manejar a nivel de usuario no experto un programa de estructura electrónica.  | AM7                     |     |
| Saber calcular con programas de química computacional propiedades moleculares básicas como energías, geometrías o frecuencias de vibración.   | AM7                     | BM2 |
| Conocer como se evalúan interacciones intermoleculares.   | AM4                     |     |
| Conocer como se determinan constantes de velocidad de reacciones químicas.  | AM4                     |     |



|   |     |             |  |
|---|-----|-------------|--|
| Entender los fundamentos del método de dinámica molecular.  | AM1 |             |  |
| Identificar información relacionada con la química computacional en la literatura científica utilizando los canales apropiados.   |     | BM7         |  |
| Utilizar terminología científica asociada a la química computacional en lengua inglesa.   |     | BM10        |  |
| Aplicar correctamente las tecnologías de captación y organización de información para solucionar problemas empleando herramientas de modelización molecular.  |     | BM7<br>BM10 |  |
| Demostrar una actitud de respeto hacia las opiniones, los valores, los comportamientos y prácticas de otros.  |     | BM14        |  |
| Que los estudiantes sepan aplicar conocimientos de modelización molecular en contextos más amplios (o multidisciplinares).  |     | BM2         |  |
| Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios. |     | BM2<br>BM7  |  |
| Definir conceptos, principios, teorías y hechos especializados en el ámbito de la modelización molecular.   | AM1 |             |  |
| Proponer alternativas para la resolución de problemas químicos complejos utilizando herramientas de química computacional.  | AM2 |             |  |
| Innovar en los métodos de caracterización de moléculas con ayuda de los métodos de química computacional.   | AM4 |             |  |
| Promover la innovación y el emprendimiento en la industria y la investigación química.  | AM9 |             |  |
| Operar con las herramientas computacionales más comunes en el ámbito de la modelización molecular.  | AM7 |             |  |

| Contenidos   |   |
|--|---|
| Tema   | Subtema   |
| Tema 1. Clasificación de métodos y características de superficies de energía potencial.  | Química computacional. Métodos de mecánica molecular. Métodos de la química cuántica.<br>Energía molecular y energía electrónica. Modelo electrostático. Separación de los movimientos electrónico y nuclear. Hipersuperficie de energía potencial (PES). |
| Tema 2. Optimización de geometrías, cálculo de frecuencias y propiedades termodinámicas. | Mínimos sobre una PES. Análisis conformacional y técnicas de muestreo. Algoritmos para optimización de geometrías. Cálculo de frecuencias de vibración. Propiedades termodinámicas.   |
| Tema 3. Interacciones intermoleculares y efectos del disolvente.                         | Interacciones intermoleculares. Error de superposición de base. Efectos del disolvente. Modelos de polarización continua.   |
| Tema 4. Introducción a la dinámica molecular.  | Métodos para modelización molecular dependiente del tiempo. Particularizaciones de las ecuaciones del movimiento en dinámica molecular. Condiciones periódicas y otros elementos de los estudios de dinámica molecular.                                   |
| Práctica 1. Cálculos básicos sobre estructura molecular.                                 | Ejemplos prácticos de cálculos básicos usando métodos de química computacional.   |
| Práctica 2. Aplicaciones en espectroscopía.  | Aplicación de la química computacional a problemas espectroscópicos.  |
| Práctica 3. Cálculo de índices de reactividad.   | Estudio de la reactividad química de sistemas modelo.   |
| Práctica 4. Estudio de reacciones químicas.  | Estudio de reacciones químicas representativas.   |

| Planificación             |               |                    |  |               |
|---------------------------|---------------|--------------------|--|---------------|
| Metodologías / pruebas    | Competencias  | Horas presenciales | Horas no presenciales / trabajo autónomo | Horas totales |
| Prácticas a través de TIC | A7 B7 B10 B14 | 17                 | 6  | 23            |
| Trabajos tutelados        | A2 A4 A9      | 0                  | 25                                       | 25            |
| Prueba mixta              | A1 B10        | 2                  | 8  | 10            |
| Sesión magistral          | A1 B2         | 4                  | 12                                       | 16            |



|   |  |   |   |   |
|---|--|---|---|---|
| Atención personalizada  |  | 1 | 0 | 1 |
| (*)Los datos que aparecen en la tabla de planificación són de carácter orientativo, considerando la heterogeneidad de los alumnos |  |   |   |   |

| Metodologías              |   |
|---------------------------|---|
| Metodologías              | Descripción   |
| Prácticas a través de TIC | <p>En ellas, el profesor de cada universidad propondrá al alumno las prácticas más convenientes, según su formación previa. Dado el carácter aplicado de esta asignatura son la parte principal. Sirven para que el alumno adquiera familiaridad con la utilización de los programas de química computacional y la metodología de trabajo de esta disciplina. Para estas prácticas, el alumno dispondrá de un breve guión de cada una de ellas. Tras una explicación del profesor, el alumno realizará individualmente, o en grupos de dos, los cálculos necesarios para la consecución de los objetivos de la práctica. Tomará todas las notas que considere oportunas. Terminado el periodo de prácticas deberá presentar una memoria escueta que recoja método y resultados obtenidos y, de ser necesario, su discusión.</p> <p>La asistencia a estas clases es obligatoria. Las faltas deberán ser justificadas documentalmente, aceptándose razones de salud, así como aquellos casos contemplados en la normativa universitaria vigente. La práctica no realizada se recuperará de acuerdo con el profesor correspondiente.</p> |
| Trabajos tutelados        | El profesor encargado de las prácticas en cada Universidad propondrá a los alumnos un ejercicio computacional que deberán llevar a cabo individualmente y que será evaluado.  |
| Prueba mixta              | Examen final breve. El examen final versará sobre la totalidad de los contenidos de la asignatura e incluirá cuestiones relativas a las prácticas de laboratorio, diferentes en cada universidad, que supondrán el 20% de la nota global de la asignatura. El 10% restante se evaluará con las cuestiones relacionadas con las clases expositivas (comunes a las tres universidades).   |
| Sesión magistral          | Lección impartida por el coordinador de la materia. Puede tener formatos diferentes (teoría, problemas y/o ejemplos generales, directrices generales de la materia?). El profesor puede contar con apoyo de medios audiovisuales e informáticos pero, en general, los estudiantes no necesitan manejarlos en clase. Estas clases seguirán los contenidos en la Guía Docente de la asignatura. La asistencia a estas clases no es obligatoria, pero sí es recomendable.  |

| Atención personalizada |   |
|------------------------|---|
| Metodologías           | Descripción   |
| Trabajos tutelados     | Los alumnos del máster podrán acudir a tutorías para solicitar orientación o resolver dudas sobre cualquier aspecto puntual o general de la asignatura. Para ello, harán uso del horario de tutorías del profesor correspondiente. Se recomienda que el alumnado emplee las tutorías para buscar asesoramiento para realizar el trabajo dirigido. |

| Evaluación         |              |   |              |
|--------------------|--------------|---|--------------|
| Metodologías       | Competencias | Descripción   | Calificación |
| Trabajos tutelados | A2 A4 A9     | La evaluación continua tendrá un peso del 70% en la calificación de la asignatura y constará de dos componentes: prácticas (30%) y trabajo dirigido (40%).  | 40           |
| Prueba mixta       | A1 B10       | El examen final versará sobre la totalidad de los contenidos de la asignatura e incluirá cuestiones relativas a las prácticas de laboratorio, diferentes en cada universidad, que supondrán el 20% de la nota global de la asignatura. El 10% restante se evaluará con las cuestiones relacionadas con las clases expositivas (comunes a las tres universidades). | 30           |



|                           |               |  |    |
|---------------------------|---------------|--|----|
| Prácticas a través de TIC | A7 B7 B10 B14 | La evaluación continua tendrá un peso del 70% en la calificación de la asignatura y constará de dos componentes: prácticas (30%) y trabajo dirigido (40%). | 30 |
|---------------------------|---------------|--|----|

### Observaciones evaluación

La evaluación de esta materia se hará mediante evaluación continua, en la que tendrá especial importancia el trabajo desarrollado en las prácticas y en trabajo dirigido. También se realizará un examen final breve. Será obligatorio asistir a las prácticas. Las prácticas no realizadas se recuperarán de acuerdo con el profesor. En todo caso, para aprobar la asignatura, será requisito imprescindible haber realizado el trabajo dirigido. Los alumnos repetidores tendrán el mismo régimen de asistencia a las clases que los que cursan la asignatura por primera vez. El alumno debe estudiar los conceptos teóricos introducidos en los distintos temas, así como las notas personales que haya tomado durante la realización de las prácticas y la memoria que elabore tras su realización. Aquellos alumnos que encuentren dificultades importantes pueden acudir en las horas de tutoría del profesor a solicitar la ayuda oportuna.

### Fuentes de información

|                       |   |
|-----------------------|---|
| <b>Básica</b>         | - F. Jensen (2007). Introduction to Computational Chemistry. Wiley<br>- J. B. Foresman, A. Frisch, (1996). Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods. Gaussian Inc. |
| <b>Complementaria</b> |   |

### Recomendaciones

#### Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente

#### Asignaturas que se recomienda cursar simultáneamente

#### Asignaturas que continúan el temario

### Otros comentarios

Recomendaciones para el estudio de la materia:

? - Se considera conveniente asistir a las clases expositivas.

? - Es fundamental mantener el estudio de la materia ?al día?.

? - La asignatura es fundamentalmente práctica. Es por ello, muy importante, que el alumno participe activamente en estas clases. Cualquier duda que pudiera surgir deberá ser consultada con el profesor.

? - La realización cuidadosa del trabajo dirigido es fundamental.

Recomendaciones de cara a la recuperación: El profesor de cada universidad analizará con aquellos alumnos que no superen con éxito el proceso de evaluación, y si así lo desean, las dificultades encontradas en el aprendizaje de los contenidos de la asignatura.

(\*) La Guía Docente es el documento donde se visualiza la propuesta académica de la UDC. Este documento es público y no se puede modificar, salvo cosas excepcionales bajo la revisión del órgano competente de acuerdo a la normativa vigente que establece el proceso de elaboración de guías