



Teaching Guide				
Identifying Data			2016/17	
Subject (*)	Modelización Molecular	Code	610509006	
Study programme	Mestrado en Investigación Química e Química Industrial (plan 2016)			
Descriptors				
Cycle	Period	Year	Type	Credits
Official Master's Degree	Yearly	First	Optativa	3
Language	GalicianEnglish			
Teaching method	Face-to-face			
Prerequisites				
Department	Química Fundamental			
Coordinador	Platas Iglesias, Carlos	E-mail	carlos.platas.iglesias@udc.es	
Lecturers	Ojea Cao, Vicente Platas Iglesias, Carlos	E-mail	vicente.ojea@udc.es carlos.platas.iglesias@udc.es	
Web				
General description				

Study programme competences	
Code	Study programme competences
A1	Define concepts, principles, theories and specialized facts of different areas of chemistry.
A2	Suggest alternatives for solving complex chemical problems related to the different areas of chemistry.
A4	Innovate in the methods of synthesis and chemical analysis related to the different areas of chemistry
A7	Operate with advanced instrumentation for chemical analysis and structural determination.
B2	Students should apply their knowledge and ability to solve problems in new or unfamiliar environments within broader (or multidisciplinary) contexts related to their field of study.
B7	Identify information from scientific literature by using appropriate channels and integrate such information to raise and contextualize a research topic
B10	Use of scientific terminology in English to explain the experimental results in the context of the chemical profession
B14	Demonstrate an attitude of respect for the opinions, values, behaviors and practices of others.

Learning outcomes		
Learning outcomes	Study programme competences	
Adquirir os coñecementos básicos sobre os métodos computacionais máis usados na actualidade.	AC1	
Saber seleccionar o método de cálculo máis adecuado para un problema determinado tendo en conta os recursos computacionais dispoñibles.	AC2	
Manexar a nivel de usuario non experto un programa de estrutura electrónica.	AC7	
Saber calcular con programas de química computacional propiedades moleculares básicas como enerxías, xeometrías ou frecuencias de vibración.	AC7	BC2
Coñecer como se avalían interaccións intermoleculares.	AC4	
Coñecer como se determinan constantes de velocidade de reaccións químicas.	AC4	
Entender os fundamentos do método de dinámica molecular.	AC1	
Identificar información relacionada coa química computacional na literatura científica utilizando os canais apropiados.		BC7
Utilizar terminoloxía científica asociada á química computacional en lingua inglesa.		BC10
Aplicar correctamente as tecnoloxías de captación e organización de información para solucionar problemas empregando ferramentas de modelización molecular.		BC7 BC10
Demostrar unha actitude de respecto cara as opinións, os valores, os comportamentos e prácticas dos outros.		BC14
Que os estudantes saiban aplicar coñecementos de modelización molecular en contextos máis amplos (ou multidisciplinares).		BC2



Que os estudantes sexan capaces de integrar coñecementos e enfrontarse á complexidade de formular xuízos a partir dunha información que, sendo incompleta ou limitada, inclúa reflexións sobre as responsabilidades sociais e éticas vencelladas á aplicación dos seus coñecementos e xuízos.		BC2 BC7	
Definir conceptos, principios, teorías e feitos especializados no ámbito da modelización molecular.	AC1		
Propoñer alternativas para a resolución de problemas químicos complexos utilizando ferramentas de química computacional.	AC2		
Innovar nos métodos de caracterización de moléculas con axuda dos métodos de química computacional.	AC4		
Operar coas ferramentas computacionais máis comúns no ámbito da modelización molecular.	AC7		

Contents	
Topic	Sub-topic
Tema 1. Clasificación de métodos e características de superficies de enerxía potencial.	Química computacional. Métodos de mecánica molecular. Métodos da química cuántica. Enerxía molecular e enerxía electrónica. Modelo electrostático. Separación dos movementos electrónico e nuclear. Hipersuperficie de enerxía potencial (PES).
Tema 2. Optimización de xeometrías, cálculo de frecuencias e propiedades termodinámicas.	Mínimos sobre unha PES. Análise conformacional e técnicas de mostreo. Algoritmos para optimización de xeometrías. Cálculo de frecuencias de vibración. Propiedades termodinámicas.
Tema 3. Interaccións intermoleculares e efectos do disolvente.	Interaccións intermoleculares. Erro de superposición de base. Efectos do disolvente. Modelos de polarización continua.
Tema 4. Introducción á dinámica molecular.	Métodos para modelización molecular dependente do tempo. Particularizacións das ecuacións do movemento en dinámica molecular. Condicións periódicas e outros elementos dos estudos de dinámica molecular.
Práctica 1. Cálculos básicos sobre estrutura molecular.	Exemplos prácticos de cálculos básicos usando métodos de química computacional.
Práctica 2. Aplicacións en espectroscopía.	Aplicacións da química computacional a problemas espectroscópicos.
Práctica 3. Cálculo de índices de reactividade.	Estudo da reactividade química de sistemas modelo.
Práctica 4. Estudo de reaccións químicas.	Estudo de reaccións químicas representativas.

Planning				
Methodologies / tests	Competencies	Ordinary class hours	Student?s personal work hours	Total hours
ICT practicals	A7 B7 B10 B14	17	6	23
Supervised projects	A2 A4 A9	0	25	25
Mixed objective/subjective test	A1 B10	2	8	10
Guest lecture / keynote speech	A1 B2	4	12	16
Personalized attention		1	0	1

(\*)The information in the planning table is for guidance only and does not take into account the heterogeneity of the students.

Methodologies	
Methodologies	Description



ICT practicals	<p>Nelas, o profesor de cada universidade propoñerá ao alumno as prácticas máis convenientes, segundo a súa formación previa. Dado o carácter aplicado desta asignatura son a parte principal. Siven para que o alumno adquira familiaridade coa utilización dos programas de química computacional e a metodoloxía de traballo desta disciplina. Para estas prácticas, o alumno disporá dun breve guión de cada unha delas. Tras unha explicación do profesor, o alumno realizará individualmente, ou en grupos de dous, os cálculos necesarios para a consecución dos obxectivos da práctica. Tomará todas as notas que considere oportunas. Rematado o periodo de prácticas deberá presentar unha memoria escueta que recolla o método e resultados obtidos e, de ser necesario, a súa 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>
Supervised projects	O profesor encargado das prácticas en cada Universidade proporá aos alumnos un exercicio computacional que deberán levar a cabo individualmente e que será avaliado.
Mixed objective/subjective test	Exame final breve. O exame final versará sobre a totalidade dos contidos da asignatura e incluírá cuestións relativas ás prácticas de laboratorio, diferentes en cada universidade, que suporán o 20% da nota global da asignatura. O 10% restante avaliarase coas cuestións relacionadas coas clases expositivas (comúns ás tres universidades).
Guest lecture / keynote speech	Lección impartida polo coordinador da materia. Pode ter formatos diferentes (teoría, problemas y/ou exemplos xeraies, directrices xeraies da materia?). O profesor pode contar co apoio de medios audiovisuais e informáticos pero, en xeral, os estudantes non precisan manexalos na aula. Estas clases seguirán os contidos da Guía Docente da asignatura. A asistencia a estas clases non é obrigatoria, pero sí é recomendable.

### Personalized attention

Methodologies	Description
Supervised projects	O alumnado do mestrado poderá acudir a titorías para solicitar orientación ou resolver dúbidas sobre cualquera aspecto puntual ou xeral da asignatura. Para elo, farán uso do horario de titorías do profesor correspondente. Recoméndase que o alumnado empregue as titorías para buscar asesoramento para realizar o traballo dirixido.

### Assessment

Methodologies	Competencies	Description	Qualification
Supervised projects	A2 A4 A9	A avaliación continua terá un peso do 70% na cualificación da asignatura e constará de dúas compoñentes: prácticas (30%) e traballo dirixido (40%).	40
Mixed objective/subjective test	A1 B10	O exame final versará sobre a totalidade dos contidos da asignatura e incluírá cuestións relativas ás prácticas de laboratorio, diferentes en cada universidade, que suporán o 20% da nota global da asignatura. O 10% restante avaliarase coas cuestións relacionadas coas clases expositivas (comúns ás tres universidades).	30
ICT practicals	A7 B7 B10 B14	A avaliación continua terá un peso do 70% na cualificación da asignatura e constará de dúas compoñentes: prácticas (30%) e traballo dirixido (40%).	30

### Assessment comments

--

### Sources of information

--



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

## Recommendations

### Subjects that it is recommended to have taken before

### Subjects that are recommended to be taken simultaneously

### Subjects that continue the syllabus

### Other comments

Recomendacións para o estudo da materia: - Considerase conveniente asistir ás clases expositivas. - É fundamental manter o estudo da materia ?ao día?. - A asignatura é fundamentalmente práctica. Porén, é moi importante que o alumno participe activamente nestas clases.

Calquera dúbida que puidera xurdir deberá ser consultada co profesor. - A realización coidadosa do traballo dirixido é fundamental.

Recomendacións de cara á recuperación: O profesor de cada universidade analizará con aqueles alumnos que non superen con éxito o proceso de avaliación, e se así o desexan, as dificultades atopadas na aprendizaxe dos contidos da asignatura.

(\*)The teaching guide is the document in which the URV publishes the information about all its courses. It is a public document and cannot be modified. Only in exceptional cases can it be revised by the competent agent or duly revised so that it is in line with current legislation.