



Teaching Guide				
Identifying Data			2017/18	
Subject (*)	Molecular Modeling	Code	610509106	
Study programme	Mestrado Universitario en Investigación Química e Química Industrial (Plan 2017)			
Descriptors				
Cycle	Period	Year	Type	Credits
Official Master's Degree	Yearly	First	Optativa	3
Language	GalicianEnglish			
Teaching method	Face-to-face			
Prerequisites				
Department	Química			
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	<p>2.1. Módulo so que pertence a materia no Plan de Estudos. Materias coas que se relaciona:</p> <p>Módulo de Estructura e Reactividade Química. Relaciónase fundamentalmente coas materias deste módulo.</p> <p>2.2. Papel que xoga este curso neste bloque formativo e no conxunto do Plano de Estudos:</p> <p>É unha materia orientada a instruír o alumnado no manexo básico dos programas da química computacional. O seu carácter é fundamentalmente práctico, limitándose a introducir os conceptos de Química Teórica máis necesarios a un nivel básico.</p>			

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.
A3	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
C1	CT1 - Elaborar, escribir e defender publicamente informes de carácter científico e técnico
C3	CT3 - Traballar con autonomía e eficiencia na práctica diaria da investigación ou da actividade profesional.
C4	CT4 - Apreciar o valor da calidade e mellora continua, actuando con rigor, responsabilidade e ética profesional.

Learning outcomes			
Learning outcomes		Study programme competences	
Adquirir os coñecementos básicos sobre os métodos computacionais máis usados na actualidade.	AC1	BC2	
	AC2		
	AC7		
Saber seleccionar o método de cálculo máis adecuado para un problema determinado tendo en conta os recursos computacionais dispoñibles.		BC7	
		BC10	
Manexar a nivel de usuario non experto un programa de estrutura electrónica.	AC7	BC2	CC3



Saber calcular con programas de química computacional propiedades moleculares básicas como enerxías, xeometrías ou frecuencias de vibración.	AC2 AC7		
Coñecer como se avalían interaccións intermoleculares.	AC1 AC3		
Coñecer como se determinan constantes de velocidade de reaccións químicas.	AC1 AC2		
Entender os fundamentos do método de dinámica molecular.	AC1 AC2 AC3 AC7		
Identificar información relacionada coa química computacional na literatura científica utilizando os canais apropiados.		BC7 BC10	CC1
Utilizar terminoloxía científica asociada á química computacional en lingua inglesa.		BC7 BC10	
Aplicar correctamente as tecnoloxías de captación e organización de información para solucionar problemas empregando ferramentas de modelización molecular.		BC2 BC7 BC10	
Demostrar unha actitude de respecto cara as opinións, os valores, os comportamentos e prácticas dos outros.			CC4
Que os estudantes saiban aplicar coñecementos de modelización molecular en contextos máis amplos (ou multidisciplinares).	AC2		
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	CC4
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.	AC2 AC3		
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	A2 A3 A7 B2 B7 B10	17	6	23
Supervised projects	A1 B7 C1 C3 C4	0	25	25
Mixed objective/subjective test	A1 A3 B2	2	8	10
Guest lecture / keynote speech	A1 B10 C4	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	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. Srvén 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 período de prácticas deberá presentar unha memoria escueta que recolla o método e resultados obtidos e, de ser necesario, a súa discusión. 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.
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 tutorías para solicitar orientación ou resolver dúbidas sobre cualquera aspecto puntual ou xeral da asignatura. Para elo, farán uso do horario de tutorías do profesor correspondente. Recomendase que o alumnado empregue as tutorías para buscar asesoramento para realizar o traballo dirixido.

Assessment

Methodologies	Competencies	Description	Qualification
Supervised projects	A1 B7 C1 C3 C4	A avaliación continua terá un peso do 30% na cualificación da asignatura e constará de dúas compoñentes: prácticas (15%) e traballo dirixido (15%).	15



ICT practicals	A2 A3 A7 B2 B7 B10	A avaliación continua terá un peso do 70% na cualificación da asignatura e constará de dúas compoñentes: prácticas (15%) e traballo dirixido (15%).	15
Mixed objective/subjective test	A1 A3 B2	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 60% da nota global da asignatura. O 10% restante avaliarase coas cuestións relacionadas coas clases expositivas (comúns ás tres universidades).	70

Assessment comments

Sources of information

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

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.