



| Guía Docente | | | | |
|-----------------------|--|--------------------|-------------------------------|----------|
| Datos Identificativos | | | | 2017/18 |
| Asignatura (*) | Modelización Molecular | Código | 610509106 | |
| Titulación | Mestrado Universitario en Investigación Química e Química Industrial (Plan 2017) | | | |
| Descritores | | | | |
| Ciclo | Período | Curso | Tipo | Créditos |
| Mestrado Oficial | Anual | Primeiro | Optativa | 3 |
| Idioma | GalegoInglés | | | |
| Modalidade docente | Presencial | | | |
| Prerrequisitos | | | | |
| Departamento | Química | | | |
| Coordinación | Platas Iglesias, Carlos | Correo electrónico | carlos.platas.iglesias@udc.es | |
| Profesorado | Ojea Cao, Vicente | Correo electrónico | vicente.ojea@udc.es | |
| | Platas Iglesias, Carlos | | carlos.platas.iglesias@udc.es | |
| Web | | | | |
| Descrición xeral | <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> | | | |

| Competencias do título | |
|------------------------|--|
| Código | Competencias do título |
| A1 | CE1 - Definir conceptos, principios, teorías e feitos das diferentes áreas especializadas da Química |
| A2 | CE2 - Propoñer alternativas para resolver os problemas químicos complexos das diversas especialidades químicas |
| A3 | CE4 - Innovar en métodos de síntese e análise química relacionados coas diferentes áreas da Química. |
| A7 | CE7 - Operar con instrumentación avanzada para análise química e a determinación estrutural |
| B2 | CB7 - Que os estudantes saiban aplicar os coñecementos adquiridos e a súa capacidade de resolución de problemas en contornos novos ou pouco coñecidos dentro de contextos máis amplos (ou multidisciplinares) relacionados coa súa área de estudo. |
| B7 | CG2 - Identificar información da literatura utilizando as canles axeitadas e integrar esta información para crear e contextualizar un tema de investigación. |
| B10 | CG5 - Usar a terminoloxía científica en inglés para discutir os resultados experimentais no contexto da profesión química |
| 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. |

| Resultados da aprendizaxe | | | |
|---|-----|------|------------------------|
| Resultados de aprendizaxe | | | Competencias do título |
| Adquirir os coñecementos básicos sobre os métodos computacionais máis usados na actualidade. | AM1 | BM2 | |
| | AM2 | | |
| | AM7 | | |
| Saber seleccionar o método de cálculo máis adecuado para un problema determinado tendo en conta os recursos computacionais dispoñibles. | | BM7 | |
| | | BM10 | |
| Manexar a nivel de usuario non experto un programa de estrutura electrónica. | AM7 | BM2 | CM3 |



| | | | |
|---|--------------------------|--------------------|-----|
| Saber calcular con programas de química computacional propiedades moleculares básicas como enerxías, xeometrías ou frecuencias de vibración. | AM2 AM7 | | |
| Coñecer como se avalían interaccións intermoleculares. | AM1 AM3 | | |
| Coñecer como se determinan constantes de velocidade de reaccións químicas. | AM1 AM2 | | |
| Entender os fundamentos do método de dinámica molecular. | AM1 AM2 AM3 AM7 | | |
| Identificar información relacionada coa química computacional na literatura científica utilizando os canais apropiados. | | BM7 BM10 | CM1 |
| Utilizar terminoloxía científica asociada á química computacional en lingua inglesa. | | BM7 BM10 | |
| Aplicar correctamente as tecnoloxías de captación e organización de información para solucionar problemas empregando ferramentas de modelización molecular. | | BM2 BM7 BM10 | |
| Demostrar unha actitude de respecto cara as opinións, os valores, os comportamentos e prácticas dos outros. | | | CM4 |
| Que os estudantes saiban aplicar coñecementos de modelización molecular en contextos máis amplos (ou multidisciplinares). | AM2 | | |
| 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. | | BM2 | CM4 |
| Definir conceptos, principios, teorías e feitos especializados no ámbito da modelización molecular. | AM1 | | |
| Propoñer alternativas para a resolución de problemas químicos complexos utilizando ferramentas de química computacional. | AM2 | | |
| Innovar nos métodos de caracterización de moléculas con axuda dos métodos de química computacional. | AM2 AM3 | | |
| Operar coas ferramentas computacionais máis comúns no ámbito da modelización molecular. | AM7 | | |

| Contidos | |
|--|--|
| Temas | Subtemas |
| 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. |



Planificación

| Metodoloxías / probas | Competencias | Horas presenciais | Horas non presenciais / traballo autónomo | Horas totais |
|---------------------------|--------------------|-------------------|---|--------------|
| Prácticas a través de TIC | A2 A3 A7 B2 B7 B10 | 17 | 6 | 23 |
| Traballos tutelados | A1 B7 C1 C3 C4 | 0 | 25 | 25 |
| Proba mixta | A1 A3 B2 | 2 | 8 | 10 |
| Sesión maxistral | A1 B10 C4 | 4 | 12 | 16 |
| Atención personalizada | | 1 | 0 | 1 |

*Os datos que aparecen na táboa de planificación son de carácter orientativo, considerando a heteroxeneidade do alumnado

Metodoloxías

| Metodoloxías | Descrición |
|---------------------------|--|
| Prácticas a través de TIC | 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. Serven 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. |
| Traballos tutelados | O profesor encargado das prácticas en cada Universidade proporá aos alumnos un exercicio computacional que deberán levar a cabo individualmente e que será avaliado. |
| Proba mixta | 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). |
| Sesión maxistral | 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. |

Atención personalizada

| Metodoloxías | Descrición |
|---------------------|--|
| Traballos tutelados | O alumnado do mestrado poderá acudir a titorías para solicitar orientación ou resolver dúbidas sobre calquera 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. |

Avaliación

| Metodoloxías | Competencias | Descrición | Cualificación |
|--------------|--------------|------------|---------------|
|--------------|--------------|------------|---------------|



| | | | |
|---------------------------|--------------------|--|----|
| Traballos tutelados | 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 |
| Prácticas a través de TIC | 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 |
| Proba mixta | 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 |

Observacións avaliación

Fontes de información

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

Recomendacións

Materias que se recomenda ter cursado previamente

Materias que se recomenda cursar simultaneamente

Materias que continúan o temario

Observacións

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.

(*A Guía docente é o documento onde se visualiza a proposta académica da UDC. Este documento é público e non se pode modificar, salvo casos excepcionais baixo a revisión do órgano competente dacordo coa normativa vixente que establece o proceso de elaboración de guías