



Teaching Guide						
Identifying Data				2020/21		
Subject (*)	Molecular Modeling		Code	610509106		
Study programme	Mestrado Universitario en Investigación Química e Química Industrial (Plan 2020)					
Descriptors						
Cycle	Period	Year	Type	Credits		
Official Master's Degree	Yearly	First	Optional	3		
Language	GalicianEnglish					
Teaching method	Face-to-face					
Prerequisites						
Department	Química					
Coordinador	Ojea Cao, Vicente	E-mail	vicente.ojea@udc.es			
Lecturers	Ojea Cao, Vicente	E-mail	vicente.ojea@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 instruir o alumnado no manexo básico dos programas da química computacional. O seu carácter é fundamentalmente práctico, limitándose a introducir os conceptos de Química Teórica más necesarios a un nivel básico.</p>					
Contingency plan	<p>1. Modifications to the contents: without changes</p> <p>2. Methodologies</p> <p>*Teaching methodologies that are maintained: all</p> <p>*Teaching methodologies that are modified: All the methodologies are adapted to the virtual modality through Moodle and Teams and the planning established in the coordination calendar.</p> <p>3. Mechanisms for personalized attention to students: The personalized attention will be carried out through email or the Moodle platform at the request of the students and, as far as possible, at the time established for the tutorials. For students with part-time dedication or specific learning modalities or diversity support, personalized attention will be provided within the flexibility allowed by coordination schedules, and material and human resources.</p> <p>4. Modifications in the evaluation: without changes, contributions to the final marks of all evaluable methodologies are maintained.</p> <p>*Evaluation observations: all the observations included in the teaching guide are maintained.</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 calidad 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 más usados na actualidade.	AC1 AC2 AC7	BC2
Saber seleccionar o método de cálculo más adecuado para un problema determinado tendo en conta os recursos computacionais dispoñibles.		BC7 BC10
Manexar a nivel de usuario non experto un programa de estructura 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 avalán 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 estudiantes saibam aplicar coñecementos de modelización molecular en contextos más amplos (ou multidisciplinares).	AC2	
Que os estudiantes sexan capaces de integrar coñecementos e enfrentarse á complexidade de formular xuizos a partires dunha información que, sendo incompleta ou limitada, inclúa reflexións sobre as responsabilidades sociais e éticas vinculadas á aplicación dos seus coñecementos e xuizos.		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 más 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 mostreos. 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 estructura 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 más convenientes, segundo a súa formación previa. Dado o carácter aplicado desta asignatura son a parte principal. Sirven 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. 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 incluirá 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/u exemplos xerais, directrices xerais 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 contenidos da Guía Docente da asignatura. A asistencia a estas clases non é obligatoria, 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	A1 B7 C1 C3 C4	A avaliación continua terá un peso do 30% na cualificación da asignatura e constará de dúas componentes: 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 componentes: 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 incluirá 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.