



| 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 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> | | | |
| 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 / results | |
|---------------------------------------|---|
| Code | Study programme competences / results |
| 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 / results | | |
| Adquirir os coñecementos básicos sobre os métodos computacionais máis usados na actualidade. | AC1 AC2 AC7 | BC2 | |
| 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 / Results | Teaching hours (in-person & virtual) | 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. 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 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 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 contenidos 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 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. |

Assessment

| Methodologies | Competencies / Results | 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.