



Guía Docente				
Datos Identificativos				2020/21
Asignatura (*)	Modelización Molecular (en extinción)		Código	610509106
Titulación	Mestrado Universitario en Investigación Química e Química Industrial (Plan 2020)			
Descriptores				
Ciclo	Período	Curso	Tipo	Créditos
Mestrado Oficial	Anual	Primeiro	Optativa	3
Idioma	GalegoInglés			
Modalidade docente	Presencial			
Prerrequisitos				
Departamento	Química			
Coordinación	Ojea Cao, Vicente	Correo electrónico	vicente.ojea@udc.es	
Profesorado	Ojea Cao, Vicente	Correo electrónico	vicente.ojea@udc.es	
Web				
Descripción xeral	<p>2.1. Módulo so que pertence a materia no Plan de Estudos. Materias coas que se relaciona: 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: 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>			
Plan de continxencia	<p>1. Modificacións nos contidos: non se realizan cambios.</p> <p>2. Metodoloxías: *Metodoloxías docentes que se manteñen: todas, *Metodoloxías docentes que se modifican: todas as metodoloxías adáptanse á modalidade non presencial a través de Moodle e Teams e mantense a programación establecida no calendario de coordinación.</p> <p>3. Mecanismos de atención personalizada ao alumnado: o seguimento personalizado realizarase a través do correo electrónico ou a plataforma Moodle a demanda do alumnado e, na medida do posible, no horario establecido para as tutorías. Para os estudiantes con dedicación a tempo parcial ou modalidades específicas de aprendizaxe ou apoio á diversidade, facilitarase a atención personalizada dentro da flexibilidade permitida polos horarios de coordinación e os recursos materiais e humanos.</p> <p>4. Modificacións na avaliación: as contribucións á cualificación final das metodoloxías availables non se modifican. *Observacións de avaliación: mantéñense todas as observacións incluídas na guía docente.</p> <p>5. Modificacións da bibliografía ou webgrafía: non se realizan modificacións, todos os materiais necesarios atoparanse disponíveis en Moodle ou mediante acceso aos recursos electrónicos disponibles na Biblioteca do Centro.</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 estudiantes saibam aplicar os coñecementos adquiridos e a súa capacidade de resolución de problemas en contornos novos ou pouco coñecidos dentro de contextos más amplos (ou multidisciplinares) relacionados coa súa área de estudio.



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 más usados na actualidade.	AM1 AM2 AM7	BM2
Saber seleccionar o método de cálculo más adecuado para un problema determinado tendo en conta os recursos computacionais dispoñibles.		BM7 BM10
Manexar a nivel de usuario non experto un programa de estructura 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 avalán 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 estudiantes saibam aplicar coñecementos de modelización molecular en contextos más amplos (ou multidisciplinares).	AM2	
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.		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 más 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 mostreiro. 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	Descripción
Prácticas a través de TIC	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 metodoxía 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 incluirá cuestiós relativas ás prácticas de laboratorio, diferentes en cada universidade, que suporán o 20% da nota global da asignatura. O 10% restante avaliarase coas cuestiós relacionadas coas clases expositivas (comúns ás tres universidades).
Sesión maxistral	Lección impartida polo coordinador da materia. Pode ter formatos diferentes (teoría, problemas y/u 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 obligatoria, pero sí é recomendable.

Atención personalizada	
Metodoloxías	Descripción
Traballos tutelados	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. Recoméndase que o alumnado empregue as tutorías para buscar asesoramento para realizar o traballo dirixido.

Avaliación			
Metodoloxías	Competencias	Descripción	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 incluirá cuestiós relativas ás prácticas de laboratorio, diferentes en cada universidade, que suporán o 60% da nota global da asignatura. O 10% restante avaliarase coas cuestiós 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 recomienda 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