



Guia docente				
Datos Identificativos				2018/19
Asignatura (*)	Modelización Molecular		Código	610509106
Titulación	Mestrado Universitario en Investigación Química e Química Industrial (Plan 2017)			
Descriptores				
Ciclo	Periodo	Curso	Tipo	Créditos
Máster Oficial	Anual	Primero	Optativa	3
Idioma	GallegoInglés			
Modalidad docente	Presencial			
Prerrequisitos				
Departamento	Química			
Coordinador/a	Ojea Cao, Vicente	Correo electrónico	vicente.ojea@udc.es	
Profesorado	Ojea Cao, Vicente	Correo electrónico	vicente.ojea@udc.es	
Web				
Descripción general	2.1. Módulo al que pertenece la materia en el Plan de Estudios. Materias con las que se relaciona: Módulo de Estructura y Reactividad Química. Se relaciona fundamentalmente con las asignaturas de dicho módulo. 2.2. Papel que juega este curso en ese bloque formativo y en el conjunto del Plan de Estudios: Es una asignatura orientada a instruir a los alumnos en el manejo básico de los programas de la química computacional. Su carácter es fundamentalmente práctico, limitándose a introducir los conceptos de Química Teórica más necesarios a un nivel básico.			

Competencias del título	
Código	Competencias del título
A1	CE1 - Definir conceptos, principios, teorías y hechos especializados de las diferentes áreas de la Química
A2	CE2 -Proponer alternativas para la resolución de problemas químicos complejos de las diferentes especialidades químicas
A3	CE4 - Innovar en los métodos de síntesis y análisis químico relacionados con las diferentes áreas de la Química.
A7	CE7 - Operar con instrumentación avanzada para el análisis químico y la determinación estructural
B2	CB7 - Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.
B7	CG2 - Identificar información de la literatura científica utilizando los canales apropiados e integrar dicha información para plantear y contextualizar un tema de investigación
B10	CG5 - Utilizar terminología científica en lengua inglesa para argumentar los resultados experimentales en el contexto de la profesión química
C1	CT1 - Elaborar, escribir y defender públicamente informes de carácter científico y técnico.
C3	CT3 - Trabajar con autonomía y eficiencia en la práctica diaria de la investigación o de la actividad profesional.
C4	CT4 - Apreciar el valor de la calidad y la mejora continua, actuando con rigor, responsabilidad y ética profesional.

Resultados de aprendizaje			
Resultados de aprendizaje		Competencias del título	
Adquirir conocimientos básicos sobre los métodos computacionales más usados en la actualidad.	AM1	BM2	
	AM2		
	AM7		
Saber seleccionar el método de cálculo más adecuado para un problema determinado teniendo en cuenta los recursos computacionales disponibles.		BM7	
		BM10	
Manejar a nivel de usuario no experto un programa de estructura electrónica.	AM7	BM2	CM3



Saber calcular con programas de química computacional propiedades moleculares básicas como energías, geometrías o frecuencias de vibración.	AM2 AM7		
Conocer como se evalúan interacciones intermoleculares.	AM1 AM3		
Conocer como se determinan constantes de velocidad de reacciones químicas.	AM1 AM2		
Entender los fundamentos del método de dinámica molecular.	AM1 AM2 AM3 AM7		
Identificar información relacionada con la química computacional en la literatura científica utilizando los canales apropiados.		BM7 BM10	CM1
Utilizar terminología científica asociada a la química computacional en lengua inglesa.		BM7 BM10	
Aplicar correctamente las tecnologías de captación y organización de información para solucionar problemas empleando herramientas de modelización molecular.		BM2 BM7 BM10	
Demostrar una actitud de respeto hacia las opiniones, los valores, los comportamientos y prácticas de otros.			CM4
Que los estudiantes sepan aplicar conocimientos de modelización molecular en contextos más amplios (o multidisciplinares).	AM2		
Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios.		BM2	CM4
Definir conceptos, principios, teorías y hechos especializados en el ámbito de la modelización molecular.	AM1		
Proponer alternativas para la resolución de problemas químicos complejos utilizando herramientas de química computacional.	AM2		
Innovar en los métodos de caracterización de moléculas con ayuda de los métodos de química computacional.	AM2 AM3		
Operar con las herramientas computacionales más comunes en el ámbito de la modelización molecular.	AM7		

Contenidos	
Tema	Subtema
Tema 1. Clasificación de métodos y características de superficies de energía potencial.	Química computacional. Métodos de mecánica molecular. Métodos de la química cuántica. Energía molecular y energía electrónica. Modelo electrostático. Separación de los movimientos electrónico y nuclear. Hipersuperficie de energía potencial (PES).
Tema 2. Optimización de geometrías, cálculo de frecuencias y propiedades termodinámicas.	Mínimos sobre una PES. Análisis conformacional y técnicas de muestreo. Algoritmos para optimización de geometrías. Cálculo de frecuencias de vibración. Propiedades termodinámicas.
Tema 3. Interacciones intermoleculares y efectos del disolvente.	Interacciones intermoleculares. Error de superposición de base. Efectos del disolvente. Modelos de polarización continua.
Tema 4. Introducción a la dinámica molecular.	Métodos para modelización molecular dependiente del tiempo. Particularizaciones de las ecuaciones del movimiento en dinámica molecular. Condiciones periódicas y otros elementos de los estudios de dinámica molecular.
Práctica 1. Cálculos básicos sobre estructura molecular.	Ejemplos prácticos de cálculos básicos usando métodos de química computacional.



Práctica 2. Aplicaciones en espectroscopía.	Aplicación de la química computacional a problemas espectroscópicos.
Práctica 3. Cálculo de índices de reactividad.	Estudio de la reactividad química de sistemas modelo.
Práctica 4. Estudio de reacciones químicas.	Estudio de reacciones químicas representativas.

Planificación				
Metodologías / pruebas	Competencias	Horas presenciales	Horas no presenciales / trabajo autónomo	Horas totales
Prácticas a través de TIC	A2 A3 A7 B2 B7 B10	17	6	23
Trabajos tutelados	A1 B7 C1 C3 C4	0	25	25
Prueba mixta	A1 A3 B2	2	8	10
Sesión magistral	A1 B10 C4	4	12	16
Atención personalizada		1	0	1
(*) Los datos que aparecen en la tabla de planificación són de carácter orientativo, considerando la heterogeneidad de los alumnos				

Metodologías	
Metodologías	Descripción
Prácticas a través de TIC	En ellas, el profesor de cada universidad propondrá al alumno las prácticas más convenientes, según su formación previa. Dado el carácter aplicado de esta asignatura son la parte principal. Sirven para que el alumno adquiera familiaridad con la utilización de los programas de química computacional y la metodología de trabajo de esta disciplina. Para estas prácticas, el alumno dispondrá de un breve guión de cada una de ellas. Tras una explicación del profesor, el alumno realizará individualmente, o en grupos de dos, los cálculos necesarios para la consecución de los objetivos de la práctica. Tomará todas las notas que considere oportunas. Terminado el periodo de prácticas deberá presentar una memoria escueta que recoja método y resultados obtenidos y, de ser necesario, su 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.
Trabajos tutelados	El profesor encargado de las prácticas en cada Universidad propondrá a los alumnos un ejercicio computacional que deberán llevar a cabo individualmente y que será evaluado.
Prueba mixta	Examen final breve. El examen final versará sobre la totalidad de los contenidos de la asignatura e incluirá cuestiones relativas a las prácticas de laboratorio, diferentes en cada universidad, que supondrán el 20% de la nota global de la asignatura. El 10% restante se evaluará con las cuestiones relacionadas con las clases expositivas (comunes a las tres universidades).
Sesión magistral	Lección impartida por el coordinador de la materia. Puede tener formatos diferentes (teoría, problemas y/o ejemplos generales, directrices generales de la materia?). El profesor puede contar con apoyo de medios audiovisuales e informáticos pero, en general, los estudiantes no necesitan manejarlos en clase. Estas clases seguirán los contenidos en la Guía Docente de la asignatura. La asistencia a estas clases no es obligatoria, pero sí es recomendable.

Atención personalizada	
Metodologías	Descripción
Trabajos tutelados	Los alumnos del máster podrán acudir a tutorías para solicitar orientación o resolver dudas sobre cualquier aspecto puntual o general de la asignatura. Para ello, harán uso del horario de tutorías del profesor correspondiente. Se recomienda que el alumnado emplee las tutorías para buscar asesoramiento para realizar el trabajo dirigido.



Evaluación			
Metodologías	Competencias	Descripción	Calificación
Trabajos tutelados	A1 B7 C1 C3 C4	La evaluación continua tendrá un peso del 70% en la calificación de la asignatura y constará de dos componentes: prácticas (30%) y trabajo dirigido (40%).	15
Prácticas a través de TIC	A2 A3 A7 B2 B7 B10	La evaluación continua tendrá un peso del 70% en la calificación de la asignatura y constará de dos componentes: prácticas (30%) y trabajo dirigido (40%).	15
Prueba mixta	A1 A3 B2	El examen final versará sobre la totalidad de los contenidos de la asignatura e incluirá cuestiones relativas a las prácticas de laboratorio, diferentes en cada universidad, que supondrán el 20% de la nota global de la asignatura. El 10% restante se evaluará con las cuestiones relacionadas con las clases expositivas (comunes a las tres universidades).	70

Observaciones evaluación
La evaluación de esta materia se hará mediante evaluación continua, en la que tendrá especial importancia el trabajo desarrollado en las prácticas y en trabajo dirigido. También se realizará un examen final breve. Será obligatorio asistir a las prácticas. Las prácticas no realizadas se recuperarán de acuerdo con el profesor. En todo caso, para aprobar la asignatura, será requisito imprescindible haber realizado el trabajo dirigido. Los alumnos repetidores tendrán el mismo régimen de asistencia a las clases que los que cursan la asignatura por primera vez. El alumno debe estudiar los conceptos teóricos introducidos en los distintos temas, así como las notas personales que haya tomado durante la realización de las prácticas y la memoria que elabore tras su realización. Aquellos alumnos que encuentren dificultades importantes pueden acudir en las horas de tutoría del profesor a solicitar la ayuda oportuna.

Fuentes de información	
Básica	- J. B. Foresman, A. Frisch, (1996). Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods. Gaussian Inc. - F. Jensen (2007). Introduction to Computational Chemistry. Wiley
Complementaria	

Recomendaciones
Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente
Asignaturas que se recomienda cursar simultáneamente
Asignaturas que continúan el temario
Otros comentarios
Recomendaciones para el estudio de la materia:- Se considera conveniente asistir a las clases expositivas. ? - Es fundamental mantener el estudio de la materia ?al día?. - La asignatura es fundamentalmente práctica. Es por ello, muy importante, que el alumno participe activamente en estas clases. Cualquier duda que pudiera surgir deberá ser consultada con el profesor. ? - La realización cuidadosa del trabajo dirigido es fundamental. Recomendaciones de cara a la recuperación: El profesor de cada universidad analizará con aquellos alumnos que no superen con éxito el proceso de evaluación, y si así lo desean, las dificultades encontradas en el aprendizaje de los contenidos de la asignatura.

(*) La Guía Docente es el documento donde se visualiza la propuesta académica de la UDC. Este documento es público y no se puede modificar, salvo cosas excepcionales bajo la revisión del órgano competente de acuerdo a la normativa vigente que establece el proceso de elaboración de guías