



FACULTADE DE QUÍMICA

Máster en Industria e Investigación Química

MODELIZACIÓN MOLECULAR

Guía Docente

Guía Docente.

1. Datos descriptivos de la materia.

Carácter: Formación especializada

Convocatoria: Noviembre-Enero

Créditos: 3 ECTS

Profesorado:

Ricardo Antonio Mosquera Castro

Catedrático del Departamento de Química Física (Univ. Vigo),
Facultad de Química.

Clases expositivas: 4 horas

Clases prácticas: 17 horas (alumnos matriculados en Univ. Vigo)

Grupos de tutorías: Alumnos matriculados en Univ. Vigo

Berta Fernández Rodríguez

Catedrática del Departamento de Química Física (Univ. Santiago de Compostela),
Facultad de Química.

Clases expositivas: -

Clases prácticas: 17 horas (alumnos matriculados en Univ. Santiago de Compostela)

Grupos de tutorías: Alumnos matriculados en Univ. Santiago de Compostela

Carlos Platas Iglesias

Profesor Titular de Universidad del Departamento de Química Fundamental (Univ. A Coruña),
Facultad de Ciencias.

Clases expositivas: -

Clases prácticas: 17 horas (alumnos matriculados en Univ. A Coruña)

Grupos de tutorías: Alumnos matriculados en Univ. A Coruña

Idioma en que es impartida: Castellano, gallego e inglés

2. Situación, significado e importancia de la materia en el ámbito de la titulación.

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.

2.3. Conocimientos previos (recomendados/obligatorios) que los estudiantes han de poseer para cursar la asignatura.

Es obligatorio haber cursado con anterioridad las asignaturas del módulo de formación.

3. Objetivos del aprendizaje y competencias a alcanzar por el estudiante con la asignatura.

3.1. Objetivos del aprendizaje.

- Adquirir conocimientos básicos sobre los métodos computacionales más usados en la actualidad.
- Saber seleccionar el método de cálculo más adecuado para un problema determinado teniendo en cuenta los recursos computacionales disponibles.
- Manejar a nivel de usuario no experto un programa de estructura electrónica.
- Saber calcular con programas de química computacional propiedades moleculares básicas como energías, geometrías o frecuencias de vibración.
- Conocer como se evalúan interacciones intermoleculares.
- Conocer como se determinan constantes de velocidad de reacciones químicas.
- Entender los fundamentos del método de dinámica molecular.

3.2. Competencias generales.

- Identificar información en la literatura científica utilizando los canales apropiados e integrar dicha información para plantear y contextualizar un tema de investigación.
- Utilizar terminología científica en lengua inglesa para argumentar los resultados experimentales en el contexto de la profesión química.
- Aplicar correctamente las nuevas tecnologías de captación y organización de información para solucionar problemas en la actividad profesional.

- Demostrar una actitud de respeto hacia las opiniones, los valores, los comportamientos y prácticas de otros.
- 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.
- 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.

3.3. Competencias específicas.

- Definir conceptos, principios, teorías y hechos especializados de las diferentes áreas de la Química.
- Proponer alternativas para la resolución de problemas químicos complejos de las diferentes especialidades químicas.
- Innovar en los métodos de síntesis y análisis químico relacionados con las diferentes áreas de la Química.
- Promover la innovación y el emprendimiento en la industria y la investigación química.
- Operar con instrumentación avanzada para el análisis químico y la determinación estructural.

3.4. Competencias transversales.

- Capacidad para trabajar en grupo tanto en la resolución como en la discusión de problemas.

• 4. *Contenidos del curso.*

4.1. Epígrafes del curso:

Contenidos teóricos:

Tema 1. Clasificación de métodos y características de superficies de energía potencial.

Tema 2. Optimización de geometrías, cálculo de frecuencias y propiedades termodinámicas.

Tema 3. Interacciones intermoleculares y efectos del disolvente.

Tema 4. Introducción a la dinámica molecular.

Programa de prácticas:

Práctica 1. Cálculos básicos sobre estructura molecular

Práctica 2. Aplicaciones en espectroscopía.

Práctica 3. Cálculo de índices de reactividad.

Práctica 4. Estudio de reacciones químicas.

4.2. Bibliografía recomendada

4.2.1. Básica (manual de referencia).

F. Jensen, "Introduction to Computational Chemistry", 2007, Wiley.

4.2.2. Complementaria.

Libro de prácticas:

J. B. Foresman, A. Frisch, "Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods", 1996, Gaussian Inc.

TEMA 1. Clasificación de métodos y características de superficies de energía potencial.

1. Sentido del tema (Introducción)

En este tema se describirán las características fundamentales de los principales métodos de la química computacional (métodos cuánticos y de mecánica molecular). Se presentará el concepto de superficie de energía potencial y su relación con las aproximaciones que permiten separar los movimientos electrónico y nuclear. Se describirán sus proyecciones sobre diferentes coordenadas y las formas en que estas pueden seleccionarse, las características (primeras y segundas derivadas de la energía respecto a las coordenadas seleccionadas) de los puntos críticos que permiten su reconocimiento y clasificación. También se describirá la idoneidad y/o limitaciones de cada grupo de métodos para localizarlos.

2. Epígrafes del tema.

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).

3. Bibliografía

F. Jensen, "Introduction to Computational Chemistry", 2007, Wiley.

4. Actividades a desarrollar.

Se trata de un tema introductorio y de gran extensión, por lo que no se plantea ninguna actividad específica, salvo el repaso de los conceptos fundamentales y la orientación específica a los estudiantes que lo requieran.

TEMA 2. Optimización de geometrías, cálculo de frecuencias y prop. Termodinámicas.

1. Sentido del tema (Introducción)

La obtención de una geometría de mínima energía es un punto de partida habitual para los estudios de química computacional. En este tema se revisan brevemente los algoritmos que permiten localizarlos. Se plantea el problema de la localización de mínimos absolutos y las alternativas para su tratamiento (técnicas de exploración de la PES y análisis conformacional). Asimismo, se revisa la aproximación armónica para el cálculo de frecuencias de vibración y la relación entre estas y diferentes propiedades termodinámicas.

2. Epígrafes del tema.

Mínimos sobre una PES. Análisis conformacional y técnicas de muestreo. Algoritmos para optimización de geometrías. Cálculo de frecuencias de vibración. Propiedades termodinámicas.

3. Bibliografía

F. Jensen, "Introduction to Computational Chemistry", 2007, Wiley.

4. Actividades a desarrollar.

Se planteará, exclusivamente para los estudiantes cuya muy escasa o nula formación previa en química computacional lo aconseje, un ejercicio para que el alumno localice los principales puntos críticos para la PES aproximada por un método de cálculo de bajo coste computacional para una molécula simple.

TEMA 3. Interacciones intermoleculares y efectos del disolvente.

1. Sentido del tema (Introducción)

Hasta este punto se ha considerado una molécula aislada. Se hace necesario trabajar con sistemas más próximos a la realidad del químico. Se introducen las interacciones entre dos moléculas y un principal problema básico asociado en química computacional: el error de superposición de base. Entre las interacciones que afectan al comportamiento de una molécula tienen especial interés químico las debidas al disolvente. Se revisan brevemente las distintas alternativas para modelizar este efecto, centrando el estudio sobre los modelos de polarización continua (PCM).

2. Epígrafes del tema.

Interacciones intermoleculares. Error de superposición de base. Efectos del disolvente. Modelos de polarización continua.

3. Bibliografía

F. Jensen, "Introduction to Computational Chemistry", 2007, Wiley.

4. Actividades a desarrollar.

Se planteará, exclusivamente para aquellos estudiantes cuya formación previa en química computacional lo aconseje, un ejercicio sobre la energía de asociación de un aducto sencillo.

TEMA 4. Introducción a la dinámica molecular.

1. Sentido del tema (Introducción)

Se resumen los principales aspectos de los estudios de dinámica molecular. El tema se reduce a dinámica molecular clásica de moléculas aisladas o en disolución diluida.

2. Epígrafes del tema.

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.

3. Bibliografía

F. Jensen, "Introduction to Computational Chemistry", 2007, Wiley.

4. Actividades a desarrollar.

Se trata de un tema introductorio, por lo que no se plantea ninguna actividad específica, salvo la orientación específica a los estudiantes que lo requieran.

5. - Indicaciones metodológicas y atribución de carga ECTS.

5.1. Atribución de créditos ECTS.

TRABAJO PRESENCIAL EN EL AULA	HORAS	TRABAJO PERSONAL DEL ALUMNO	HORAS
Clases expositivas en grupo grande	4	Estudio autónomo individual o en grupo	16
Clases prácticas en aula de informática	17	Preparación del trabajo de laboratorio y elaboración de la memoria de las prácticas	13
Trabajos dirigidos	0	Realización del trabajo	25
Total horas trabajo presencial en el aula o en el laboratorio	21	Total horas trabajo personal del alumno	54

5.2. Actividades formativas en el aula con presencia del profesor

A) *Clases expositivas*: 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.

B) *Clases prácticas*: 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.

C) *Trabajo dirigido*: 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.

D) *Tutorías*: 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.

5.3. 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.

5.4. Calendario de actividades.

- Las clases se impartirán siguiendo el calendario establecido para las distintas materias del máster, intercalando sesiones expositivas y de prácticas.

6. Indicaciones sobre la evaluación.

6.1. Procedimiento de 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.

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%).

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).

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.

6.2. Recomendaciones de cara a la evaluación.

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.

6.3. 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.