

27230 - Introducción al modelado molecular

Información del Plan Docente

Año académico	2016/17
Centro académico	100 - Facultad de Ciencias
Titulación	452 - Graduado en Química
Créditos	5.0
Curso	4
Periodo de impartición	Segundo Semestre
Clase de asignatura	Optativa
Módulo	---

1. Información Básica

1.1. Recomendaciones para cursar esta asignatura

Se recomienda:

- Tener aprobadas, al menos, las asignaturas de 1er curso.
- Haber cursado las asignaturas: Química Física I y II y así tener conocimientos básicos de Química Física en general y de Química Cuántica en particular.
- Realizar un trabajo regular y continuado a lo largo del curso.
- Acostumbrarse a consultar bibliografía relacionada con la asignatura y a trabajar con programas empleados durante el curso.

1.2. Actividades y fechas clave de la asignatura

El calendario correspondiente al curso así como las fechas y horarios de clases y exámenes de la asignatura se pueden consultar en la siguiente página de Internet: <http://ciencias.unizar.es/web/horarios.do>

Las fechas correspondientes a los controles, seminarios y prácticas se indicarán a lo largo del curso. Los horarios y fechas de prácticas estarán condicionados por la disponibilidad de aula informática pero se adaptarán en la medida de lo posible a la disponibilidad horaria de los alumnos matriculados.

En el apartado "Evaluación" se indican las actividades de evaluación y su distribución temporal aproximada.

2. Inicio

2.1. Resultados de aprendizaje que definen la asignatura

El estudiante, para superar esta asignatura, deberá demostrar los siguientes resultados...

Que conoce los conceptos y aspectos básicos del modelado molecular (tanto clásico como cuántico), así como el manejo de programas informáticos propios la materia.

Es capaz de seleccionar el nivel de cálculo más adecuado al problema experimental.

27230 - Introducción al modelado molecular

Es capaz de realizar modelado computacional de reacciones químicas sencillas y de propiedades de la estructura electrónica a escala molecular. Conoce la aplicabilidad a un amplio rango de problemas químicos.

Es capaz de proponer, localizar e identificar estructuras moleculares estables; y de trabajar en la búsqueda de estados de transición.

Sabe realizar cálculo teórico de parámetros cinéticos y termodinámicos de reacciones orgánicas sencillas.

Tiene las bases para realizar la representación computacional de sistemas moleculares complejos.

Es capaz de elaborar y presentar informes de resultados o de estudios realizados tanto por él como por otros.

2.2.Introducción

Breve presentación de la asignatura

Asignatura optativa del módulo avanzado a impartir en el segundo cuatrimestre, con 5 créditos ECTS. El 50% de las actividades presenciales son teóricas, y el otro 50% es práctico y se llevará a cabo en aula informática usando programas informáticos adecuados disponibles.

El término Modelado Molecular engloba métodos teóricos y técnicas computacionales para modelar o "imitar" el comportamiento de las moléculas y predecir propiedades que se derivan del mismo. Estas técnicas se usan prácticamente en todos los campos de la química y se utilizan para estudiar los sistemas moleculares, desde moléculas pequeñas hasta sistemas químicos de gran tamaño como moléculas biológicas o sólidos. En las técnicas de modelado molecular la descripción del sistema es a nivel molecular, y el tratamiento puede obviar la estructura electrónica y usar la mecánica clásica (Métodos de Mecánica Molecular), o utilizar la mecánica cuántica teniendo en cuenta de forma explícita los electrones (Métodos de estructura electrónica).

En esta asignatura se presentan los conceptos básicos y los métodos fundamentales del modelado molecular tanto desde el punto de vista teórico como práctico mediante la aplicación de los conocimientos a problemas diversos.

3.Contexto y competencias

3.1.Objetivos

La asignatura y sus resultados previstos responden a los siguientes planteamientos y objetivos:

- Introducir a los alumnos en aspectos básicos de los métodos y técnicas que sirven para modelar computacionalmente sistemas o problemas químicos.
- Hacerlo tanto desde el punto de vista teórico como práctico.
- Ver la aplicación de los principales métodos de modelado molecular para un amplio rango de problemas químicos. Mostrar asimismo las limitaciones.
- Mostrar la relación entre fundamentos teóricos y los cálculos o las propiedades que es posible calcular mediante distintos modelos aplicados a sistemas reales.

3.2.Contexto y sentido de la asignatura en la titulación

Asignatura optativa del módulo avanzado del grado de Química (correspondiente al 4º curso). Se imparte en el segundo semestre.

Es una introducción a los métodos y técnicas que sirven para modelar computacionalmente problemas químicos (especialmente, pero no únicamente, los métodos de estructura electrónica); útil para comprender sus usos y

27230 - Introducción al modelado molecular

aplicaciones en distintas áreas de la química. La asignatura sirve para adquirir conocimientos y habilidades en el campo del modelado molecular.

3.3.Competencias

Al superar la asignatura, el estudiante será más competente para...

Comprender y representar el comportamiento desde el punto de vista químico-físico de la materia a nivel microscópico y relacionarlo con el macroscópico.

Aplicar el método científico a la resolución de problemas químicos. Y de elaborar y presentar informes de resultados o de estudios con el rigor de dicho método.

Conocer aspectos químico-físicos fundamentales (de química cuántica, termodinámica, cinética, etc.) y de aplicarlos a la interpretación y modelización de diversos sistemas químicos.

Conocer los conceptos básicos del modelado molecular tanto clásico como cuántico de sistemas de naturaleza orgánica e inorgánica.

Comprender las ventajas y limitaciones de los métodos y técnicas de la química teórica y computacional.

Ser capaz de identificar las características del problema experimental y seleccionar la técnica de modelado más adecuada.

Aplicar de manera efectiva métodos y técnicas del modelado molecular a problemas de diseño molecular.

Manejar aplicaciones informáticas para un tratamiento mecano-cuántico de sistemas químicos complejos.

El manejo y manipulación de representaciones 3D de sistemas moleculares así como de sus propiedades electrónicas.

3.4.Importancia de los resultados de aprendizaje

Los resultados del aprendizaje de esta asignatura proporcionarán al alumno conocimientos y habilidades básicos de modelado molecular.

La importancia radica en que la química computacional es una herramienta usada por muchas áreas de la química para buscar, racionalizar, predecir estructuras, reactividad o propiedades de moléculas o sistemas químicos en general. No solo es un complemento de los estudios experimentales, también ayuda a comprenderlos.

4.Evaluación

El estudiante deberá demostrar que ha alcanzado los resultados de aprendizaje previstos mediante las siguientes actividades de evaluación:

Evaluación progresiva basada en:

1. El trabajo realizado en el aula informática y en los informes elaborados a partir del trabajo y los resultados obtenidos (se valorarán los resultados, la corrección en la presentación y el análisis/interpretación de los resultados): un 50% de la nota final. Calificación **A** . La asistencia a las prácticas y la presentación de los guiones dentro del plazo establecido son obligatorias.

27230 - Introducción al modelado molecular

2. Una prueba **P**, esencialmente práctica, realizada al final de las prácticas en el caso de la convocatoria de junio, y en la fecha establecida por la Facultad en el caso de la convocatoria de septiembre: 25%. Calificación **B**.
3. Evaluación de los contenidos teóricos y de problemas: 25%. Calificación **C**:

-Ejercicios y problemas a realizar y entregar de forma individualizada a lo largo del curso: Calificación **C1**.

-Una prueba teórico-práctica **T**, esencialmente de las clases magistrales, realizada en el periodo de exámenes en la fecha establecida por la Facultad: Calificación **C2**.

En la evaluación progresiva. La nota final será:

$$\text{Nota final} = 0,5 \times \mathbf{A} + 0,25 \times \mathbf{B} + 0,25 \times \mathbf{C} \quad (1)$$

Donde la calificación **C** será la más alta de las obtenidas con las ecuaciones (2) y (3)

$$\mathbf{C} = 0,20 \times \mathbf{C1} + 0,80 \times \mathbf{C2} \quad (2)$$

$$\mathbf{C} = \mathbf{C2} \quad (3)$$

Solamente si un alumno no se ha presentado a ninguna de las pruebas **P** y **T** (que conducen a las calificaciones **B** y **C2**) aparecerá como no presentado en el acta.

La calificación de las partes superadas se conservará durante todo el periodo de vigencia de matrícula.

En el caso de que un alumno matriculado en esta asignatura no haya realizado todas las prácticas y presentado los guiones, la evaluación será mediante una prueba global en la que el estudiante será evaluado de todas las actividades realizadas durante el curso. Se realizará en las fechas establecidas por la Facultad. Se aprueba o suspende la asignatura completa. La nota final será igual a la obtenida en la prueba global.

El número de convocatorias oficiales de examen a las que la matrícula da derecho (2 por matrícula) así como el consumo de dichas convocatorias se ajustará a la [a Normativa de Permanencia en Estudios de Grado](http://wzar.unizar.es/servicios/coord/norma/evalu/evalu.html) y Reglamento de Normas de Evaluación del Aprendizaje. A este último reglamento, también se ajustarán los criterios generales de diseño de las pruebas y sistema de calificación, y de acuerdo a la misma se hará público el horario, lugar y fecha en que se celebrará la revisión al publicar las calificaciones. Dicha normativa puede consultarse en: <http://wzar.unizar.es/servicios/coord/norma/evalu/evalu.html>

5.Actividades y recursos

5.1.Presentación metodológica general

El proceso de aprendizaje que se ha diseñado para esta asignatura se basa en lo siguiente:

El proceso de aprendizaje constará de:

Actividad Formativa 1: Adquisición de los contenidos teóricos del modelado molecular (2,5 ECTS) en clases magistrales participativas en grupo grande, en seminarios y en tutorías.

Actividad Formativa 2: Prácticas de ordenador realizadas de forma individual y supervisadas por el profesor con el objeto

27230 - Introducción al modelado molecular

de adquirir los conocimientos y destrezas básicas en el manejo de los programas informáticos de cálculo y de visualización molecular (0,3 ECTS).

Actividad Formativa 3: Prácticas en laboratorio informático sobre problemas de modelado molecular (2,2 ECTS) utilizando software específico. Metodología: Ejecución individualizada de la práctica de ordenador, con supervisión del profesor, en aula informática, en grupo reducido; y elaboración de informes.

La asistencia, realización y presentación de informes de todas las prácticas son obligatorias.

5.2.Actividades de aprendizaje

El programa que se ofrece al estudiante para ayudarle a lograr los resultados previstos comprende las siguientes actividades:

1. **Teoría:** Métodos de la Química Computacional
2. **Aplicación de programas de cálculo molecular a problemas químicos.**

5.3.Programa

1. Teoría: Métodos de la Química Computacional

Introducción a la Química Computacional. Métodos de Mecánica Molecular o Campos de fuerza (MM). Interacciones entre átomos ligados. Interacciones electrostáticas y interacciones de tipo van der Waals. Campos de Fuerza.

Métodos químico-cuánticos o métodos de estructura electrónica (QM). Teoría de Orbitales Moleculares. Conjuntos de base. Método de Hartree-Fock. Correlación electrónica. Introducción a la teoría del funcional de la densidad (DFT). Sistemas de capa cerrada y de capa abierta.

Ventajas y limitaciones prácticas de los métodos MM y QM. Criterios para la selección del nivel de cálculo. Introducción a los programas de cálculo de estructura electrónica y visualización molecular. Recursos web. Ejercicios prácticos: Construcción y diseño de estructuras moleculares orgánicas e inorgánicas.

2. Aplicación de programas de cálculo molecular a problemas químicos

Hipersuperficies de energía potencial. Determinación de puntos estacionarios (mínimos y estados de transición) mediante la optimización de geometrías. Caracterización mediante el cálculo de frecuencias. Técnicas de minimización de la energía. Estrategias de búsqueda de estados de transición. El camino de reacción, coordenada de reacción intrínseca. Análisis y búsqueda conformacional, mínimos absolutos y relativos. Determinación de propiedades termoquímicas en reacciones modelo. Cálculo de parámetros cinéticos de reacciones químicas. Cálculo teórico de efectos cinéticos isotópicos. Otras aplicaciones.

5.4.Planificación y calendario

Calendario de sesiones presenciales y presentación de trabajos

El calendario de la asignatura en cuanto a clases presenciales magistrales se podrá consultar en:
<http://ciencias.unizar.es/web/horarios.do>

27230 - Introducción al modelado molecular

El calendario de sesiones prácticas se anunciará oportunamente en clase y en los tabloneros del departamento.

Las fechas de entrega de informes de prácticas y otros trabajos se anunciarán en clase.

5.5. Bibliografía y recursos recomendados

- | | |
|-----------|--|
| BB | Jensen, Frank. Introduction to computational chemistry / Frank Jensen . - 2nd ed. Chichester [etc.] : John Wiley & Sons, cop. 2007 |
| BB | Jensen, Jan H.. Molecular modeling basics / Jan H. Jensen Boca Raton, FL [etc.] : CRC Press, 2010 |
| BB | Levine, Ira N.. Química cuántica / Ira N. Levine ; traducción Alberto Requena Rodríguez, Adolfo Bastida Pascual, José Zúñiga Román . - 5ª ed. Madrid [etc.] : Prentice Hall, D.L. 2001 |
| BB | Química cuántica : Fundamentos y aplicaciones computacionales / Joan Bertran Rusca...[et al.] Madrid : Síntesis, D.L. 2000 |
| BC | Cramer, Christopher J.. Essentials of computational chemistry : theories and models / Christopher J. Cramer . - 2nd ed. Chichester : John Wiley & Sons, 2006 |
| BC | Foresman, J. E.; Frisch, Æ.. Exploring Chemistry with electronic structure methods: A Guide to Using Gaussian. 2nd. ed. Gaussian Inc. 1996 |
| BC | Hinchliffe, A.. Modelling molecular structures. 2nd. Wiley. 2000 |
| BC | Leach, Andrew R.. Molecular modelling : principles and applications / Andrew R. Leach . - 2nd ed. New York : Prentice Hall, 2001 |

27230 - Introducción al modelado molecular

LISTADO DE URL:

Blog: Computational Organic Chemistry
(Steven M. Bachrach) -
[<http://comporgchem.com/blog/>]

Blog: Henry Rzepa (Chemistry with a twist)
- [<http://www.ch.imperial.ac.uk/rzepa/blog/>]

Blog: Molecular Modeling Basics -
[<http://molecularmodelingbasics.blogspot.com.es/>]

MolCalc, molecule calculator -
[<http://molcalc.org/>]

Página oficial de Gaussian -
[<http://www.gaussian.com/index.htm>]