

## 27230 - Introducción al modelado molecular

### Información del Plan Docente

<b>Año académico</b>	2018/19
<b>Asignatura</b>	27230 - Introducción al modelado molecular
<b>Centro académico</b>	100 - Facultad de Ciencias
<b>Titulación</b>	452 - Graduado en Química
<b>Créditos</b>	5.0
<b>Curso</b>	4
<b>Periodo de impartición</b>	Segundo Semestre
<b>Clase de asignatura</b>	Optativa
<b>Módulo</b>	---

### 1. Información Básica

#### 1.1. Objetivos de la asignatura

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.

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

#### 1.3. Recomendaciones para cursar la 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.

### 2. Competencias y resultados de aprendizaje

## 27230 - Introducción al modelado molecular

### 2.1. 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 para 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.

### 2.2. Resultados de aprendizaje

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.

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.

### 2.3. 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.

### 3. Evaluación

#### 3.1. Tipo de pruebas y su valor sobre la nota final y criterios de evaluación para cada prueba

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.
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:

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

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

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

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

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

## 27230 - Introducción al modelado molecular

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 Normativa de Permanencia en Estudios de Grado](#) 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>

### 4. Metodología, actividades de aprendizaje, programa y recursos

#### 4.1. 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 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.

#### 4.2. 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.**

#### 4.3. 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

## 27230 - Introducción al modelado molecular

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.

### 4.4. Planificación de las actividades de aprendizaje y calendario de fechas clave

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>

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

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

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.

### 4.5. Bibliografía y recursos recomendados

#### LISTADO DE URL:

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

Blog: Henry Rzepa (Chemistry with a twist) -

## 27230 - Introducción al modelado molecular

[<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.html>]