

Curso Académico: 2022/23

## 27230 - Introducción al modelado molecular

### Información del Plan Docente

**Año académico:** 2022/23

**Asignatura:** 27230 - Introducción al modelado molecular

**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

**Materia:**

## 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 los aspectos básicos de los métodos y técnicas que sirven para modelar computacionalmente sistemas químicos a escala molecular.
- Utilizar programas informáticos para modelar y obtener información para un amplio rango de problemas químicos como, por ejemplo, estructura molecular, propiedades moleculares, reactividad química, enlace químico, radicales...
- Comprender cuestiones de naturaleza química a nivel molecular.

Estos planteamientos y objetivos están alineados con los siguientes Objetivos de Desarrollo Sostenible (ODS) de la Agenda 2030 de Naciones Unidas (<https://www.un.org/sustainabledevelopment/es/>), de tal manera que la adquisición de los resultados de aprendizaje de la asignatura proporciona capacitación y competencia para contribuir en cierta medida a su logro.

- Objetivo 4: Educación de calidad.
- Objetivo 7: Energía asequible y no contaminante.
- Objetivo 9: Industria, innovación e infraestructuras.

### 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

### 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.
- 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...**

- 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.
- Puede proponer, localizar e identificar estructuras moleculares estables y trabajar en la búsqueda de estados de transición.
- Sabe realizar el 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 basada en:

1. El trabajo realizado en las prácticas del aula informática y entrega de informes de resultados. Se entregarán un total de 4 informes de prácticas. Para la realización de cada informe se dispondrá de una plantilla. Este bloque supone el 50 % de la nota final.
2. Prueba escrita de evaluación (duración máxima de 1 hora) de los contenidos teóricos: 25 % de la nota final.
3. Trabajo autónomo en equipo (2-3 alumnos). Se presentará una memoria conjunta (máximo 10 páginas) cuya calificación supondrá el 25 % de la nota final.

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 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.

## 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 los informes solicitados 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.**

Las actividades docentes y de evaluación se llevarán a cabo de modo presencial salvo que, debido a la situación sanitaria, las disposiciones emitidas por las autoridades competentes y por la Universidad de Zaragoza obliguen a realizarlas de forma telemática o semi-telemática con aforos reducidos rotatorios.

### 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 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 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, prácticas y entrega de informes de prácticas se indicarán a lo largo del curso en clase y en los tablones del departamento. 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

[http://biblos.unizar.es/br/br\\_citas.php?codigo=27230&year=2022](http://biblos.unizar.es/br/br_citas.php?codigo=27230&year=2022)