



Máster en Química Molecular y Catálisis Homogénea 60457 - Modelización molecular

Guía docente para el curso 2014 - 2015

Curso: 1, Semestre: 2, Créditos: 2.0

Información básica

Profesores

- Francisco Javier Modrego Pérez modrego@unizar.es

- Luis Salvatella Ibáñez lsalvate@unizar.es

Recomendaciones para cursar esta asignatura

Es recomendable tener conocimientos previos de Química Cuántica (nivel Grado o Licenciatura, prioritariamente en Química). El conocimiento de sistemas operativos UNIX/Linux (nivel de usuario) puede ser útil, aunque no se requiere.

Actividades y fechas clave de la asignatura

Las actividades programadas se realizarán durante el segundo semestre en sesiones de dos horas semanales. Toda la información sobre horarios, calendario y exámenes está disponible en: <http://ciencias.unizar.es/web/horarios.do>. La presentación de trabajos se realizará de acuerdo al calendario que se anunciará oportunamente con suficiente antelación.

Inicio

Resultados de aprendizaje que definen la asignatura

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

- 1:** Comprender los métodos de química computacional usados en el estudio de moléculas orgánicas o inorgánicas y ser capaz de usarlos adecuadamente para el estudio de la estructura molecular, las propiedades espectroscópicas y la reactividad química, incluyendo los mecanismos de reacción.
- 2:** Comprender la componente teórica de un estudio combinado experimental/computacional y valorar la relevancia de la aportación teórica.
- 3:** Comprender el concepto de superficie de energía potencial, cómo se explora y representa, y su relación con el mecanismo de una reacción.

- 4: Comprender cómo los orbitales moleculares, los análisis de población electrónica, las densidades electrónicas o los potenciales electrostáticos moleculares pueden usarse en la interpretación del enlace químico y la reactividad.
- 5: Comprender el papel del disolvente y la solvatación en la reactividad química y cómo puede tratarse desde un punto de vista teórico.
- 6: Aplicar los conceptos derivados de la química computacional al análisis y resolución de problemas químicos, así como a la comprensión de la síntesis, estructura y reactividad de los compuestos químicos.

Introducción

Breve presentación de la asignatura

La asignatura pretende introducir al alumno en los métodos de la química computacional con el fin de que sea capaz, al menos, de comprender críticamente los resultados presentados, cada vez con más frecuencia, en la bibliografía primaria.

Contexto y competencias

Sentido, contexto, relevancia y objetivos generales de la asignatura

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

La asignatura pretende introducir al alumno en los métodos de la química computacional ya que los resultados computacionales son una parte, cada vez más habitual, de los resultados presentados en la bibliografía primaria en Química. Para ello, se presentará al alumno la base teórica necesaria para que, al menos, sea capaz de comprender críticamente los resultados presentados.

Una parte importante es la comprensión de la metodología de los estudios computacionales, para lo se realizará alguna aplicación práctica sencilla.

Contexto y sentido de la asignatura en la titulación

La asignatura *Modelización Molecular* es una asignatura optativa de 2 ECTS que se imparte en el segundo cuatrimestre. La asignatura se encuadra dentro del módulo *Caracterización Estructural*. Dado el uso creciente de las herramientas de química computacional y teórica en todos los ámbitos la química, se considera necesario que el alumno, no especializado en química teórica, sea capaz de comprender los usos, aplicaciones, dificultades y limitaciones de los métodos de la química computacional en el estudio de los compuestos y su reactividad.

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

- 1: Comprender el significado de la terminología con la que se presentan los resultados de los estudios de química computacional en la bibliografía química.
- 2: Comprender el fundamento de los métodos de química computacional, que se le presenten en el manejo de la bibliografía química habitual.
- 3: Plantear, de modo elemental, los pasos necesarios para realizar un estudio computacional de, por si mismo o en colaboración con especialistas.
- 4:

Presentar en sus trabajos, de modo crítico, los resultados de química computacional relevantes, obtenidos mediante la colaboración con especialistas en dicho campo.

Importancia de los resultados de aprendizaje que se obtienen en la asignatura:

La relevancia de las competencias adquiridas se deriva de la expansión del uso química computacional en todos los ámbitos de la química, dado que se ha convertido en una herramienta presente en química incluso como complemento de estudios experimentales.

Evaluación

Actividades de evaluación

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

1:

La evaluación continua de esta asignatura está basada en las siguientes actividades con la ponderación que se indica:

1.- Controles de resolución de problemas y cuestiones teórico-prácticas (20 %).

2.- Trabajos de carácter práctico (20 %).

3.- Prueba escrita a realizar en el periodo de evaluación global basada en la resolución de problemas y cuestiones teórico-prácticas (60 %).

2:

La calificación final será la mejor de las siguientes notas:

NOTA 1 = $0,2 \times \text{nota de controles} + 0,2 \times \text{nota del trabajo presentado} + 0,6 \times \text{nota prueba escrita global}$

NOTA 2 = nota prueba escrita 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 Máster 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>

Actividades y recursos

Presentación metodológica general

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

El proceso de aprendizaje diseñado para la asignatura está basado en clases expositivas de carácter participativo que se complementarán con clases de resolución de problemas, seminarios y tutorías. A lo largo del curso se realizarán ejercicios prácticos que desarrollen e ilustren el contenido de dichas clases magistrales, así como prácticas de cálculo computacional. El proceso de aprendizaje se complementará con el análisis, exposición y discusión de artículos de investigación recientes que presenten el uso de métodos computacionales.

Actividades de aprendizaje programadas (Se incluye programa)

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

- 1:** Clases expositivo-participativas (1.2 ECTS).
- 2:** Resolución de problemas y seminarios (0.2 ECTS).
- 3:** Prácticas con ordenador (0.6 ECTS).
- 4:** Trabajos dirigidos.
- 5:** Tutorías en grupo reducido o personalizadas.
- 6:** Las actividades de aprendizaje previstas están basadas en el siguiente programa:
 - 1.- Introducción a la química computacional.
 - 2.- Introducción al uso de entornos computacionales y programas de aplicación en química.
 - 3.- Concepto de superficie de potencial.
 - 4.- Métodos empíricos: Mecánica molecular, fundamentos, aplicaciones y limitaciones.
 - 5.- Métodos teóricos químico cuánticos WFT y DFT.
 - 6.- Estudio de resultados: Análisis de la función de onda. Propiedades moleculares.
 - 7.- Solvatación y efecto del disolvente.
 - 8.- Aplicaciones al estudio de la estructura, reactividad molecular y mecanismos de reacción.
 - 9.- Uso de programas de química computacional.

Planificación y calendario

Calendario de sesiones presenciales y presentación de trabajos

Los horarios de la asignatura y fechas de exámenes se publican en el tablón de anuncios y en la página web de la Facultad de Ciencias: <http://ciencias.unizar.es/web/horarios.do>. La presentación de trabajos se realizará de acuerdo al calendario que se anunciará oportunamente con la suficiente antelación.

Bibliografía

Bibliografía Básica

En reprografía y/o a través del Anillo Digital Docente se proporcionará al alumno diverso material docente preparado por los profesores de la asignatura (<https://moodle2.unizar.es/add/>).

- 1.- The Basics of Theoretical and Computational Chemistry. B. M. Rode, T. S. Hofer, M. D. Kugler. Ed. VCH, 2007.
- 2.- Molecular Modelling for Beginners (2ª Edición). A. Hinchliffe. Ed. Wiley, 2008.
- 3.- Computational Chemistry: Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics. E. G. Lewars. Ed. Springer, 2010.
- 4.- Molecular Modeling Basics. J. H. Jensen, Ed. CRC Press, 2010.

Bibliografía Complementaria

1.- Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models (2ª Edición). C. J. Cramer. Ed. Wiley, 2004.

2.- Introduction to Computational Chemistry (2ª Edición). F. Jensen. Ed. Wiley, 2007.

Referencias bibliográficas de la bibliografía recomendada