

## 60457 - Modelización molecular

### Información del Plan Docente

**Año académico:** 2023/24

**Asignatura:** 60457 - Modelización molecular

**Centro académico:** 100 - Facultad de Ciencias

**Titulación:** 543 - Máster Universitario en Química Molecular y Catálisis Homogénea

**Créditos:** 2.0

**Curso:** 1

**Periodo de impartición:** Segundo semestre

**Clase de asignatura:** Optativa

**Materia:**

### 1. Información básica de la asignatura

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.

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, en particular en relación con los objetivos: 4, educación de calidad; 7, energía asequible y no contaminante; y 12, producción y consumo responsables.

### 2. Resultados de aprendizaje

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.

Comprender la componente teórica de un estudio combinado experimental/computacional y valorar la relevancia de la aportación teórica.

Comprender el concepto de superficie de energía potencial, cómo se explora y representa, y su relación con el mecanismo de una reacción.

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.

Comprender el papel del disolvente y la solvatación en la reactividad química y cómo puede tratarse desde un punto de vista teórico.

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.

### 3. Programa de la asignatura

El programa de la asignatura consta de los siguientes temas:

- 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 teóricos químico cuánticos WFT y DFT.
- 5.- Aplicaciones al estudio de la estructura, reactividad molecular y mecanismos de reacción.
- 6.- Uso de programas de química computacional.

### 4. Actividades académicas

Clases expositivo-participativas (1.2 ECTS).

Resolución de problemas y seminarios (0.2 ECTS).

Prácticas con ordenador (0.6 ECTS).

Tutorías en grupo reducido o personalizadas.

## 5. Sistema de evaluación

La evaluación continua de esta asignatura está basada en una rueba práctica a realizar en el periodo de evaluación global consistente en la resolución de problemas y cuestiones teórico-prácticas similares a las tratadas en el curso (100 %).

La calificación final será la de 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 Máster* y al *Reglamento de Normas de Evaluación del Aprendizaje*(<https://ciencias.unizar.es/normativas-asuntos-academicos>), y de acuerdo a la misma se hará público el horario, lugar y fecha en que se celebrará la revisión al publicar las calificaciones.