

27230 - Introducción al modelado molecular

Información del Plan Docente

Año académico: 2024/25

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 de la asignatura

La asignatura responde 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, entre otros
- Comprender cuestiones de naturaleza química a nivel molecular.

Es una asignatura optativa del módulo avanzado del grado de Química (correspondiente al 4º curso). Se imparte en el segundo semestre y se recomienda haber cursado la asignatura de Química Física II

La asignatura sirve para adquirir conocimientos y habilidades en el campo del modelado molecular, enfatizando en el manejo práctico de programas informáticos de química computacional.

2. Resultados de aprendizaje

- Conoce los conceptos y aspectos básicos del modelado molecular, así como el manejo de programas informáticos.
- 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.
- Puede proponer, localizar y caracterizar estructuras moleculares estables, obteniendo sus propiedades químicas y físicas.
- Sabe realizar el cálculo teórico de parámetros cinéticos y termodinámicos de reacciones orgánicas sencillas.
- Tiene las bases para analizar sistemas bioquímicos básicos.
- Es capaz de elaborar y presentar informes de resultados o de estudios realizados tanto por él como por otros.

La importancia de estos resultados radica en que la química computacional es una herramienta usada por muchas áreas de la química para comprender y predecir estructuras, reactividad o propiedades de moléculas o sistemas químicos en general.

3. Programa de la asignatura

1. Teoría: Métodos de la Química Computacional

Introducción a la Química Computacional.

Métodos de Mecánica Molecular o Campos de fuerza (MM).

Métodos químico-cuánticos o métodos de estructura electrónica (QM).

Método de Hartree-Fock y de correlación electrónica. Introducción a la teoría del funcional de la densidad (DFT).

Enlace, estructura y reactividad química.

Introducción a los programas de cálculo y visualización molecular. Recursos web.

2. Aplicación de programas de cálculo molecular a problemas químicos diversos.

Hipersuperficies de energía potencial, optimización de geometrías, obtención de energías.

Determinación de propiedades moleculares y espectroscópicas.

Efecto del disolvente e interacciones no covalentes.

Reactividad orgánica, efecto isotópico cinético.

Catálisis homogénea organometálica.

Análisis conformacional y dinámica de proteínas.

4. Actividades académicas

El proceso de aprendizaje constará de:

Actividad Formativa 1: Adquisición de los contenidos teóricos (2,5 ECTS) en clases magistrales participativas en grupo.

Actividad Formativa 2: Prácticas de ordenador realizadas de forma individual y supervisadas por el profesor en el manejo de los programas informáticos de química computacional (0,3 ECTS).

Actividad Formativa 3: Prácticas en laboratorio informático sobre problemas de modelado molecular (2,2 ECTS).

La asistencia a prácticas, realización y presentación de los informes solicitados son obligatorias.

5. Sistema de evaluación

Las actividades de evaluación son las siguientes:

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.

Los estudiantes que no hayan realizado todas las prácticas y presentado los guiones, serán evaluados mediante una prueba global en las fechas de las convocatorias oficiales establecidas por la Facultad.

6. Objetivos de Desarrollo Sostenible

4 - Educación de Calidad

7 - Energía Asequible y No Contaminante

9 - Industria, Innovación e Infraestructura