



1. DATOS GENERALES

Asignatura: MODELIZACIÓN MOLECULAR

Tipología: OBLIGATORIA

Grado: 2366 - MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA

Centro: 1 - FTAD. CC. Y TECNOLOGÍAS QUÍMICAS CR.

Curso: 1

Lengua principal de impartición: Español

Uso docente de otras lenguas:

Página web:

Código: 311122

Créditos ECTS: 6

Curso académico: 2023-24

Grupo(s): 20

Duración: Primer cuatrimestre

Segunda lengua:

English Friendly: S

Bilingüe: N

Profesor: BERNABE BALLESTEROS RUIZ - Grupo(s): 20				
Edificio/Despacho	Departamento	Teléfono	Correo electrónico	Horario de tutoría
Marie Curie, primera planta	QUÍMICA FÍSICA	926052049	bernabe.ballesteros@uclm.es	L,M: 9-11h J: 17-19h
Profesor: MARIA REYES LOPEZ ALAÑÓN - Grupo(s): 20				
Edificio/Despacho	Departamento	Teléfono	Correo electrónico	Horario de tutoría
Marie Curie (segunda planta))	QUÍMICA FÍSICA	926052779	reyes.lopez@uclm.es	Martes y Miércoles: 10-12 h Jueves: 17-19 h
Profesor: MARIA DEL PILAR PRIETO NUÑEZ-POLO - Grupo(s): 20				
Edificio/Despacho	Departamento	Teléfono	Correo electrónico	Horario de tutoría
San Alberto Magno	QUÍMICA INORG., ORG., Y BIOQ.	+34926052615	maripilar.prieto@uclm.es	martes y miércoles de 17-19 h
Profesor: LUCIA SANTOS PEINADO - Grupo(s): 20				
Edificio/Despacho	Departamento	Teléfono	Correo electrónico	Horario de tutoría
Edificio Marie Curie/2.05	QUÍMICA FÍSICA	926052480	lucia.santos@uclm.es	lunes y martes de 17 -19h

2. REQUISITOS PREVIOS

Son necesarias nociones básicas de Química Cuántica y Computacional

3. JUSTIFICACIÓN EN EL PLAN DE ESTUDIOS, RELACIÓN CON OTRAS ASIGNATURAS Y CON LA PROFESIÓN

El objetivo de la asignatura es el que los alumnos profundicen en los conocimientos de Química Cuántica y Computacional previamente adquiridos en el grado de Ciencias Químicas.

Junto con la teoría y el experimento, la simulación (modelización) es el tercer pilar del conocimiento científico. Desde la década de los 90 del siglo pasado, el desarrollo de ordenadores de gran potencia y bajo coste, así como el desarrollo de programas informáticos con interfaces de usuario sencillas ha permitido que el uso de herramientas computacionales no se limite al químico especializado y sea una herramienta habitual para todo el entorno químico.

Se pretende, pues, dar una visión global de la Química desde la perspectiva de la modelización como eje vertebral de todos los conocimientos adquiridos en los estudios de grado.

4. COMPETENCIAS DE LA TITULACIÓN QUE LA ASIGNATURA CONTRIBUYE A ALCANZAR

Competencias propias de la asignatura

Código	Descripción
CB06	Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación
CB07	Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio
CB08	Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios
CB09	Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades
CB10	Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.
CE02	Integrar la mecánica cuántica a la determinación de la estructura y propiedades de átomos y moléculas de interés en laboratorios de investigación y desarrollo.
CE03	Conocer la utilidad de los métodos de diseño, simulación y cálculos moleculares que caracterizan la química computacional, así como tener destreza en el manejo de dichos métodos.
CE08	Diseñar un desarrollo sostenible de la química en su aplicación a nivel de investigación como en cualquier actividad profesional, a través del conocimiento avanzado de las metodologías de síntesis y análisis.
CE09	Desarrollar experimentos que sirvan de base para las actividades de I+D+i en el ámbito de la Química, facilitando su transferencia al mundo productivo mediante nuevos procedimientos normalizados de trabajo validados para laboratorios de rutina y/o control.
CG01	Transferir los conceptos y fundamentos de la Química en el contexto de la investigación científica y/o en la profesión especializada del

5. OBJETIVOS O RESULTADOS DE APRENDIZAJE ESPERADOS**Resultados de aprendizaje propios de la asignatura**

Descripción

Adquirir los conocimientos sobre el fundamento teórico, las limitaciones y los ámbitos de aplicación de los principales métodos de la Química Computacional.

Analizar los fenómenos y procesos químicos mediante simulación tanto a nivel individual como en equipo.

Aplicar las herramientas informáticas para trabajar con estaciones de trabajo remotas, realizar cálculos en éstas y transferir ficheros desde o/a estas.

Combinar las técnicas avanzadas de modelización propias de la Química, con el debido soporte computacional, así como desarrollar simulaciones que faciliten la comprensión de conceptos teóricos y experimentales.

Establecer relaciones estructura - reactividad mediante correlaciones empíricas.

Interpretar los resultados de un estudio cinético o computacional y presentarlos adecuadamente, complementados con la información obtenida de la búsqueda bibliográfica realizada previamente.

Resolver mediante métodos teóricos problemas de estructura, espectroscopía o reactividad.

6. TEMARIO

Tema 1: Tema 1: Teoría de Orbitales Moleculares. Aproximación de Born-Oppenheimer. Función de onda electrónica. Determinante de Slater. Método variacional. Aproximación CLOA. Funciones de base.

Tema 2: Tema 2: Métodos computacionales: Métodos semiempíricos y Método de Hartree-Fock.

Tema 2.1 Práctica 1: Introducción y manejo de los programas de química computacional incluyendo visualizadores gráficos.

Tema 3: Tema 3: Métodos post-Hartree-Fock. Correlación electrónica. Interacción de configuraciones. Método autoconsistente multiconfiguracional (MCSCF). Método de perturbaciones de Moller-Plesset. Métodos de Coupled-cluster. (pract.2 y 3)

Tema 3.1 Práctica 2 :Optimización de geometrías. Energías absolutas y relativas. Error de superposición de base (BSSE)

Tema 3.2 Práctica 3: Métodos de correlación electrónica. Disociación de la molécula de hidrógeno

Tema 4: Tema 4: Métodos del funcional de la densidad. Teoremas de Hohenberg y Kohn. Método de Koh-Sham. Aproximación de la densidad local. Aproximación del gradiente generalizado. Funcionales híbridos. (prácticas 6 y 7)

Tema 5: Tema 5: Superficies de energía potencial. Análisis de la superficie de energía potencial (SEP). Puntos estacionarios. Estados de transición. Coordenada de reacción intrínseca (IRC). Termodinámica y cinética Química. (pract.4 y5))

Tema 5.1 Práctica 4:Análisis de la SEP. Localización de estados de transición de reacciones unimoleculares y bimoleculares

Tema 5.2 Práctica 5: Reactividad química (Efecto túnel . Efecto cinético isotópico)

Tema 5.3 Práctica 6: Optimización de compuestos organometálicos. Estudio de las propiedades moleculares. Cargas de Mulliken y NBOs. Ordenes de enlaces. Momentos dipolares. Topologías y energías de las orbitales moleculares fronteras.

Tema 5.4 Práctica 7: Propiedades fotofísicas. Espectros de absorción y emisión. Espectros RAMAN, Espectros de RMN

Tema 5.5 Práctica 8: Estudio de la hidratación iónica. Efecto del disolvente.

Tema 6: Tema 6: Mecánica Molecular. Campos de fuerzas. Tensión de enlace. Deformación angular. Torsión. Interacciones electrostáticas. Interacción de Van der Waals. Parametrización. Campos de fuerzas disponibles. Modelización del disolvente. Simulación de la Dinámica Molecular

Tema 7: Tema 7: Métodos híbridos QMMM. Acoplamiento de las regiones QM/MM. Métodos multicapas. Cavidades.

COMENTARIOS ADICIONALES SOBRE EL TEMARIO**7. ACTIVIDADES O BLOQUES DE ACTIVIDAD Y METODOLOGÍA**

Actividad formativa	Metodología	Competencias relacionadas (para títulos anteriores a RD 822/2021)	ECTS	Horas	Ev	Ob	Descripción
Elaboración de memorias de Prácticas [AUTÓNOMA]	Autoaprendizaje	CB08 CB09 CE03	1.6	40	S	S	Informe detallado de las prácticas realizadas
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL]	Método expositivo/Lección magistral	CB06 CB08	1.16	29	S	N	Explicación de los fundamentos del temario
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA]	Resolución de ejercicios y problemas	CB07 CB08 CB10	2.4	60	S	N	El alumno de forma autónoma preparará las pruebas de evaluación
Análisis de artículos y recensión [AUTÓNOMA]	Estudio de casos	CB07 CE03	0.24	6	S	S	Se entregarán una relación de artículos de investigación en química computacional que deberán analizar
Prueba final [PRESENCIAL]	Trabajo con simuladores	CB07 CB09 CE02 CE03	0.2	5	S	S	Realización de una prueba para demostrar que han adquirido los conocimientos/utilización de los métodos computacionales para modelización
Tutorías de grupo [PRESENCIAL]	Tutorías grupales	CB09	0.08	2	S	S	
Enseñanza presencial (Prácticas) [PRESENCIAL]	Prácticas		0.32	8	S	S	
Total:			6	150			
Créditos totales de trabajo presencial: 1.76			Horas totales de trabajo presencial: 44				
Créditos totales de trabajo autónomo: 4.24			Horas totales de trabajo autónomo: 106				

Ev: Actividad formativa evaluable

Ob: Actividad formativa de superación obligatoria (Será imprescindible su superación tanto en evaluación continua como no continua)

8. CRITERIOS DE EVALUACIÓN Y VALORACIONES

Sistema de evaluación	Evaluación continua	Evaluación no continua*	Descripción
Prueba	45.00%	60.00%	Prueba final con utilización de los programas de cálculo
Elaboración de memorias de prácticas	50.00%	40.00%	
Valoración de la participación con aprovechamiento en clase	5.00%	0.00%	
Total:	100.00%	100.00%	

* En **Evaluación no continua** se deben definir los porcentajes de evaluación según lo dispuesto en el art. 4 del Reglamento de Evaluación del Estudiante de la UCLM, que establece que debe facilitarse a los estudiantes que no puedan asistir regularmente a las actividades formativas presenciales la superación de la asignatura, teniendo derecho (art. 12.2) a ser calificado globalmente, en 2 convocatorias anuales por asignatura, una ordinaria y otra extraordinaria (evaluándose el 100% de las competencias).

Criterios de evaluación de la convocatoria ordinaria:

Evaluación continua:

La asistencia a las sesiones prácticas es obligatoria.

Cada prueba de evaluación deberá alcanzar la calificación mínima de 4 puntos para superar la asignatura que tras la ponderación de todas las pruebas deberá alcanzar la calificación mínima de 5

Evaluación no continua:

Prueba final con utilización de los programas de cálculo, se superara con una nota mínima de 5

9. SECUENCIA DE TRABAJO, CALENDARIO, HITOS IMPORTANTES E INVERSIÓN TEMPORAL

No asignables a temas

Horas	Suma horas
Tema 1 (de 7): Tema 1: Teoría de Orbitales Moleculares. Aproximación de Born-Oppenheimer. Función de onda electrónica. Determinante de Slater. Método variacional. Aproximación CLOA. Funciones de base.	
Actividades formativas	Horas
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	3
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Resolución de ejercicios y problemas]	2
Prueba final [PRESENCIAL][Trabajo con simuladores]	.5
Tutorías de grupo [PRESENCIAL][Tutorías grupales]	.2
Tema 2 (de 7): Tema 2: Métodos computacionales: Métodos semiempíricos y Método de Hartree-Fock.	
Actividades formativas	Horas
Elaboración de memorias de Prácticas [AUTÓNOMA][Autoaprendizaje]	4
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	4
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Resolución de ejercicios y problemas]	10
Prueba final [PRESENCIAL][Trabajo con simuladores]	.8
Tutorías de grupo [PRESENCIAL][Tutorías grupales]	.2
Tutorías de grupo [PRESENCIAL][Tutorías grupales]	1
Comentario: Realización práctica 1	
Tema 3 (de 7): Tema 3: Métodos post-Hartree-Fock. Correlación electrónica. Interacción de configuraciones. Método autoconsistente multiconfiguracional (MCSCF). Método de perturbaciones de Moller-Plesset. Métodos de Coupled-cluster. (pract.2 y 3)	
Actividades formativas	Horas
Elaboración de memorias de Prácticas [AUTÓNOMA][Autoaprendizaje]	10
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	5
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Resolución de ejercicios y problemas]	10
Análisis de artículos y recensión [AUTÓNOMA][Estudio de casos]	2
Prueba final [PRESENCIAL][Trabajo con simuladores]	.8
Tutorías de grupo [PRESENCIAL][Tutorías grupales]	.2
Tutorías de grupo [PRESENCIAL][Tutorías grupales]	2
Comentario: Prácticas 2 y 3	
Tema 4 (de 7): Tema 4: Métodos del funcional de la densidad. Teoremas de Hohenberg y Kohn. Método de Koh-Sham. Aproximación de la densidad local. Aproximación del gradiente generalizado. Funcionales híbridos. (prácticas 6 y 7)	
Actividades formativas	Horas
Elaboración de memorias de Prácticas [AUTÓNOMA][Autoaprendizaje]	15
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	6
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Resolución de ejercicios y problemas]	15
Análisis de artículos y recensión [AUTÓNOMA][Estudio de casos]	2
Prueba final [PRESENCIAL][Trabajo con simuladores]	.8
Tutorías de grupo [PRESENCIAL][Tutorías grupales]	2
Comentario: Se realizaran las prácticas 4 y 5	
Tema 5 (de 7): Tema 5: Superficies de energía potencial. Análisis de la superficie de energía potencial (SEP). Puntos estacionarios. Estados de transición. Coordenada de reacción intrínseca (IRC). Termodinámica y cinética Química. (pract.4 y5))	
Actividades formativas	Horas
Elaboración de memorias de Prácticas [AUTÓNOMA][Autoaprendizaje]	6
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	5
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Resolución de ejercicios y problemas]	15
Prueba final [PRESENCIAL][Trabajo con simuladores]	.9
Tutorías de grupo [PRESENCIAL][Tutorías grupales]	1
Tutorías de grupo [PRESENCIAL][Tutorías grupales]	2
Comentario: Prácticas 6 y 7	
Tema 6 (de 7): Tema 6: Mecánica Molecular. Campos de fuerzas. Tensión de enlace. Deformación angular. Torsión. Interacciones electrostáticas. Interacción de Van der Waals. Parametrización. Campos de fuerzas disponibles. Modelización del disolvente. Simulación de la Dinámica Molecular	

Actividades formativas	Horas
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	3
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Resolución de ejercicios y problemas]	4
Análisis de artículos y recensión [AUTÓNOMA][Estudio de casos]	1
Prueba final [PRESENCIAL][Trabajo con simuladores]	.4
Tutorías de grupo [PRESENCIAL][Tutorías grupales]	.2
Tema 7 (de 7): Tema 7: Métodos híbridos QM/MM. Acoplamiento de las regiones QM/MM. Métodos multicapas. Cavidades.	
Actividades formativas	Horas
Elaboración de memorias de Prácticas [AUTÓNOMA][Autoaprendizaje]	5
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	3
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Resolución de ejercicios y problemas]	4
Análisis de artículos y recensión [AUTÓNOMA][Estudio de casos]	1
Prueba final [PRESENCIAL][Trabajo con simuladores]	.8
Tutorías de grupo [PRESENCIAL][Tutorías grupales]	.2
Tutorías de grupo [PRESENCIAL][Tutorías grupales]	1
Comentario: Se realizará la práctica 8	
Actividad global	
Actividades formativas	Suma horas
Análisis de artículos y recensión [AUTÓNOMA][Estudio de casos]	6
Elaboración de memorias de Prácticas [AUTÓNOMA][Autoaprendizaje]	40
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	29
Prueba final [PRESENCIAL][Trabajo con simuladores]	5
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Resolución de ejercicios y problemas]	60
Tutorías de grupo [PRESENCIAL][Tutorías grupales]	8.4
Total horas: 148.4	

10. BIBLIOGRAFÍA, RECURSOS						
Autor/es	Título/Enlace Web	Editorial	Población	ISBN	Año	Descripción
J.L. Calais	Quantum Chemistry Workbook: Basic Concepts and Procedures in the Theory of the Electronic Structure of Matter	John Wiley & Sons	INC	978-0471594352	1994	The Quantum Chemistry Workbook is a step-by-step study guide to the inner workings of nature's fundamental systems: free atoms, small molecules, polymers, and crystals.
J.B. Foresman and A. Frisch	Exploring Chemistry With Electronic Structure Methods: A Guide to Using Gaussian	Gaussian Inc	Pittsburgh	978-1935522034	2014	This book will teach you how to use electronic structure calculations to investigate chemical problems. It uses the Gaussian software
Christopher Cramer	Essential of Computational Chemistry	John Wiley & Sons	NY	ISBN: 978-0-470-0918	2004	This book provides a balanced introduction to this dynamic subject. Suitable for both experimentalists and theoreticians, a wide range of samples and applications drawn from all key areas are included. The book carefully guides the reader through the necessary equations, providing explanations of information and reasoning where necessary and firmly placing each equation in context. https://www.wiley.com/en-us/Essentials+of+Computational+Chemistry%3A+Theories+and+Models%2C+2nd+Edition-p-9780470091821#:~:text=Essentials%20of%20Computational%20Chemistry%20provides,drawn%20from%20all%20key%20areas.
F. Jensen	Introduction to Computational Chemistry	John Wiley & Sons	NY	978-1118825990	2017	Introduction to Computational Chemistry 3rd Edition provides a comprehensive account of the fundamental principles underlying different computational methods. Fully revised and updated throughout to reflect important method developments and improvements since publication of the previous edition, this timely update includes the following significant revisions and new topics: * Polarizable force fields * Tight-binding DFT * More extensive DFT functionals, excited states and time dependent molecular properties * Accelerated Molecular Dynamics methods * Tensor decomposition methods * Cluster analysis * Reduced scaling and reduced prefactor methods https://www.wiley.com/en-us/Introduction+to+Computational+Chemistry%2C+3rd+Edition-p-9781118825990
I.N Levine	Química Cuántica Computacional	Prentice Hall		84-205-3096-4	2001	Clear and precise concepts of the computational methods.
S. M. Bachrach,	Organic Chemistry. 2nd ed.;	John Wiley & Sons	Weinheim, Germany	978-1-118-29192-4	2014	
J. Bertrán et al.	Química Cuántica	Sintesis	Madrid	8477387427 / 9788477	2002	This book represents an effort to integrate the fundamentals of Quantum Mechanics, its chemical applications and computational practice, in a balanced, concise and didactic way. Special emphasis is placed on the axiomatic development of Quantum Mechanics and on the necessary simplifications to be able to apply it to real chemical systems.