



Universidad
de Alcalá

GUÍA DOCENTE

QUÍMICA COMPUTACIONAL Y DISEÑO MOLECULAR (660027)

**Grado en Química
Universidad de Alcalá**

Curso Académico 2022/2023
4º Curso – 1º Cuatrimestre

GUÍA DOCENTE

Nombre de la asignatura:	QUÍMICA COMPUTACIONAL Y DISEÑO MOLECULAR
Código:	660027
Titulación en la que se imparte:	GRADO EN QUÍMICA
Departamento y Área de Conocimiento:	QUÍMICA ANALÍTICA, QUÍMICA FÍSICA E INGENIERÍA QUÍMICA (QUÍMICA FÍSICA)
Carácter:	OPTATIVA
Créditos ECTS:	6 teóricos
Curso y cuatrimestre:	4º curso,
Profesorado:	Dr. Luis Manuel Frutos Gaité (Coordinador) Dr. Marco Marazzi
Horario de Tutoría:	A concertar con el profesor
Idioma en el que se imparte:	Español

1. PRESENTACIÓN

Esta asignatura se enmarca dentro de las materias optativas impartidas en el cuarto curso del grado de química. Su objetivo es que el alumno conozca las técnicas de la Química Computacional y su aplicación a la simulación de sistemas moleculares y la caracterización de sus propiedades. La Química Computacional y la Modelización Molecular es hoy en día una herramienta muy útil para el diseño de todo tipo de sustancias químicas (fármacos, materiales,...) así como para el estudio de la reactividad química de sistemas moleculares.

Prerrequisitos y Recomendaciones

Conocimientos básicos de química, física, matemáticas e informática a nivel de usuario. También es recomendable haber cursado y aprobado la asignatura de Química Física Molecular.

La asignatura orientada al Grado de Química, pero que puede ser de gran utilidad para alumnos de Farmacia, Biología o medicina que quieran tener un dominio y conocimiento de las modernas herramientas de la Química Computacional, que incluye el dominio y utilización del software científico dentro de este campo.

2. COMPETENCIAS

Competencias genéricas:

1. Capacidad de análisis y gestión de la información obtenida mediante el cálculo científico.
2. Capacidad de búsqueda de información y su discusión crítica en base a la bibliografía proporcionada.
3. Capacidad para plantear problemas de manera crítica adaptando el planteamiento al objetivo del problema.
4. Resolución de problemas y toma de decisiones: aplicación del pensamiento lógico y crítico en el trabajo, para dar respuesta a situaciones en el mismo momento en que se producen.
5. Desarrollo de la capacidad de trabajo en equipo y de exposición pública de trabajos y conocimientos y defensa crítica de los mismos.

Competencias específicas:

1. Saber plantear problemas reales de estructura y reactividad química desde un punto de vista teórico computacional.
2. Saber usar las metodologías/aproximaciones de la química computacional más apropiadas según el sistema a tratar y el problema a resolver.
3. Conocer el software de uso habitual en modelización molecular y discernir cuál/cuales usar según el problema a resolver.
4. Ser capaz de expresar los resultados obtenidos de los cálculos realizados en una forma científico-técnica correcta, tanto de manera oral como escrita.

3. CONTENIDOS

Tema 1^a.- *Introducción a la Química Cuántica y al Diseño Molecular*: Una ciencia en continua evolución. Visión general de la Química Cuántica actualmente, sus herramientas, sus aplicaciones y sus perspectivas de futuro.

Tema 2^a.- *Métodos Químico-Cuánticos I*: Teoría de Hartree-Fock. Métodos post Hartree-Fock: Métodos perturbativos y métodos Multiconfiguracionales. Aplicaciones y limitaciones de todos ellos.

Tema 3^a.- *Métodos Químico-Cuánticos II*: Métodos Semiempíricos: métodos de Hückel, Pople-Pariser-Parr, AM1 y PM3.

Tema 4^a.- *Métodos Químico-Cuánticos III*: Teoría del Funcional de densidad (DFT). Teorema de Hohenberg-Kohn. El método Kohn-Sham. La aproximación de densidad local y el potencial de correlación de intercambio.

Tema 5^a.- *Mecánica Molecular*. Introducción a los campos de fuerza. Términos energéticos y proceso de parametrización. Campos de fuerzas MM2, AMBER, CHARM y otros.

Tema 6^a.- *Métodos Híbridos Cuánticos/Clásicos*. División en zonas QM (mecánica cuántica) y MM (mecánica molecular) de un sistema molecular complejo. El esquema del hidrógeno como átomo de unión. Términos del hamiltoniano QM/MM y evaluación del mismo.

Tema 7^a.- *Dinámica Molecular*. Campos de fuerza y ecuaciones del movimiento en un sistema molecular. Integradores de las ecuaciones del movimiento. Colectividad microcanónica (NVE) y canónica (NVT).

Seminario 1.- *Uso de Linux y software en Química Cuántica*. Manejo básico de Linux en Química Computacional. Introducción al manejo de software específico para el diseño molecular y cálculo químico-cuántico de propiedades moleculares.

Seminario 2.- *Diseño molecular*. Diseño computacionalmente asistido de estructuras moleculares.

Seminario 3.- *Optimización de estructuras moleculares*. Desarrollo de cálculos *ab initio* para la obtención de estructuras moleculares optimizadas.

Seminario 4.- *Determinación de constantes de equilibrio*. Uso de software químico-cuántico para la determinación de energías de reacción a partir de estructuras optimizadas. Predicción de energías de reacción y estimación de constantes de equilibrio.

Seminario 5.- *Determinación computacional de mecanismos de reacción y constantes de velocidad*. Estudio de mecanismos de reacción mediante la determinación de estados de transición e intermedios de reacción. Predicción de constantes de velocidad y modelos cinéticos.

Seminario 6.- *Determinación computacional de potenciales de ionización, electroafinidades y entalpías de atomización*. Cálculo de dichas propiedades moleculares con métodos *ab initio* y DFT.

Seminario 7.- *Modelos para la inclusión del disolvente*. Aplicación de métodos químico-cuánticos de inclusión explícita e implícita de un disolvente.

Seminario 8.- *Determinación de mecanismos de reacción II*. Mecanismos complejos. Uso de propiedades electrónicas para la predicción de la reactividad química. Comparación con datos experimentales.

Seminario 9.- *Determinación de propiedades espectroscópicas moleculares*. Energías de excitación y emisión de fluorescencia con métodos multiconfiguracionales.

Seminario 10.- *Determinación de la estructura molecular y electrónica en complejos metálicos.* Estudio de interacción del metal con los ligandos en base al análisis de orbitales moleculares.

Seminario 11.- *Determinación del comportamiento dinámico de sistemas moleculares.* Desarrollo de dinámicas moleculares con potenciales *ab initio*.

Bloques de contenido (se pueden especificar los temas si se considera necesario)	Total de clases, créditos u horas
BLOQUE I.- MÉTODOS DE LA QUÍMICA COMPUTACIONAL.	<ul style="list-style-type: none"> • Créditos ECTS Totales: 3 • Clases teóricas: 18 horas. • Seminarios Grupales: 6 horas
BLOQUE III.- APLICACIONES DE LA QUÍMICA COMPUTACIONAL Y EL DISEÑO MOLECULAR (Seminarios prácticos)	<ul style="list-style-type: none"> • Créditos ECTS Totales: 3 • Clases teóricas: 6 horas. • Seminarios Grupales: 18 horas

4. METODOLOGÍAS DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE.-ACTIVIDADES FORMATIVAS

4.1. Distribución de créditos (especificar en horas)

Número de horas presenciales: 51	Clases teóricas y seminarios: 48h Tutorías ECTS: 3h
Número de horas del trabajo propio del estudiante: 99	Estudio autónomo: estudio independiente, elaboración trabajos, ejercicios.
Total horas	150

4.2. Estrategias metodológicas, materiales y recursos didácticos

Clases Teóricas	<ul style="list-style-type: none"> • Se impartirán 24 horas de clases teóricas dirigidas a explicar las metodologías computacionales así como su aplicabilidad en la resolución de problemas químicos. • Estas clases también se emplearán
-----------------	--

	<p>para orientar a los alumnos en la tarea de ampliar y profundizar en los contenidos de los diferentes temas, indicándoles los aspectos más interesantes y relevantes del programa sobre los que deben incidir.</p> <ul style="list-style-type: none">• En cuanto a los materiales y recursos didácticos, las clases presenciales teóricas se llevarán a cabo fundamentalmente clarificando los conceptos explicados en la pizarra y con la ayuda de material audiovisual (presentaciones animadas, gráficas,...) para la comprensión de los conceptos y metodologías específicas de la asignatura.
Seminarios Grupales	<ul style="list-style-type: none">• En estos seminarios suponen un total de 24 horas presenciales. Se realizarán en una sala de química computacional con el fin de que tengan un alto grado práctico.• En los seminarios se plantearán problemas generales que deberán ser resueltos por el alumno con la orientación del profesor, para los cuales se requerirá una planificación por parte del alumno de los pasos a seguir, los métodos a utilizar, seguidos finalmente de una discusión crítica de los resultados obtenidos. Esta discusión se realizará públicamente y con la participación del resto de alumnos.
Tutorías Personalizadas Regladas	<ul style="list-style-type: none">• Con un máximo de 3 horas/curso por alumno y en grupos de trabajo más pequeños, estas tutorías se utilizarán para profundizar en la comprensión de la materia y reforzar y afianzar individualmente los conocimientos adquiridos.• Con este tipo de tutorías se tratará de promover el trabajo en equipo, las habilidades de búsqueda y selección de información bibliográfica, así como de preparación de informes. También favorecerán la interacción entre los componentes del grupo y el profesor,

fomentando la crítica y autocrítica, y además permitirán mejorar la capacidad de exposición pública de los alumnos.

- Las tutorías personalizadas se basarán principalmente en la discusión individual con el alumno, por lo que no se requerirá en principio ningún material o recurso específico mas allá de los habituales (pizarra, papel,...). Asimismo, una parte de estas tutorías se podrá realizar usando la plataforma de Aula Virtual.

5. EVALUACIÓN: Procedimientos, criterios de evaluación y de calificación

Procedimientos de evaluación

- Los alumnos que por motivos excepcionales no participen en la evaluación continua deberán solicitarlo por escrito al Decano en las dos primeras semanas de impartición de la asignatura explicando las razones que le impiden seguir el sistema de evaluación continua. En caso de aceptarse tal petición, el alumno será examinado en una única prueba que evaluará las capacidades y competencias descritas en esta guía.
- Se efectuarán hasta un máximo de tres pruebas escritas a lo largo del curso. La duración de estas pruebas será de un máximo de 3 horas.
- Evaluación continua, en las clases de seminarios grupales y tutorías personalizadas regladas, así como de la calidad y presentación, y en su caso, exposición de los trabajos encomendados. Asimismo se utilizará en los casos que convenga la plataforma de Aula Virtual como soporte para el trabajo individual del alumno.
- Los alumnos que no superen la convocatoria ordinaria tendrán que realizar un examen final en la convocatoria extraordinaria

Criterios de evaluación

En el proceso de aprendizaje del alumno, se valorarán fundamentalmente los siguientes aspectos:

- Posesión y comprensión de conocimientos adquiridos, así como la capacidad de aplicación de los mismos a la resolución de problemas y la interpretación de los resultados obtenidos.
- Capacidad de observación, razonamiento crítico y comunicación de los conocimientos adquiridos.

- Cumplimiento de las obligaciones, como asistencia a los seminarios grupales y tutorías regladas, realización de los ejercicios y trabajos encomendados individuales o en grupo, exposición de esos trabajos, interés demostrado, iniciativa, etc.

Criterios de calificación

- Alumnos que participen de la evaluación continua: Las pruebas escritas (exámenes parciales) de la asignatura tendrán un peso del 75%, mientras que todas aquellas tareas propuestas en las clases de seminario y tutorías personalizadas tendrán un peso del 25%.
- Alumnos que no participen en la evaluación continua se les realizará en una única prueba en la que se evaluarán la adquisición de las capacidades y competencias, así como los conocimientos expuestos en esta guía.

6. BIBLIOGRAFÍA

Bibliografía Básica

- [1] F. Jensen, Introduction to Computational Chemistry, John Wiley and Sons, 1999.
- [2] C.J. Cramer, Essentials of Computational Chemistry, John Wiley and Sons, 2003.
- [3] A. R. Leach, Molecular Modelling, Prentice Hall, Second Edition, 2001.
- [4] A. Hinchliffe, Modelling Molecular Structures, Wiley Tutorial Series in Theoretical Chemistry, 1994.
- [6] B. Foresman, A. Frisch, Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods (Second Edition), Gaussian Inc., 1996

La Universidad de Alcalá garantiza a sus estudiantes que, si por exigencias sanitarias las autoridades competentes impidieran la presencialidad total o parcial de la actividad docente, los planes docentes alcanzarían sus objetivos a través de una metodología de enseñanza-aprendizaje y evaluación en formato online, que retornaría a la modalidad presencial en cuanto cesaran dichos impedimentos.