

Guía docente

Identificación de la asignatura

Asignatura / Grupo	11368 - Química Orgánica Computacional / 1
Titulación	Máster Universitario en Ciencia y Tecnología Química
Créditos	6
Período de impartición	Primer semestre
Idioma de impartición	Castellano

Profesores

Horario de atención a los alumnos

Profesor/a	Hora de inicio	Hora de fin	Día	Fecha inicial	Fecha final	Despacho / Edificio
Antonio Frontera Beccaria						
<i>Responsable</i> toni.frontera@uib.es	Hay que concertar cita previa con el/la profesor/a para hacer una tutoría					

Contextualización

PROFESORADO:

Prof. Antonio Frontera (doctor en Química, 1994 por la UIB) es Catedrático de Universidad del Área de Química Orgánica del Departamento de Química de la UIB. Su contribución en el campo de la Química Computacional se traduce en más de cuatro centenares de publicaciones en revistas de prestigio internacional. Además, desde hace años ha venido impartiendo la asignatura de Química Orgánica Computacional del Máster de Ciencia y Tecnología Química (MCTQ), con un contenido muy parecido a la asignatura del nuevo plan de estudios del Máster en Ciencia y Tecnología Química (MCTE).

ASIGNATURA:

Este curso persigue, como objetivo central, que los alumnos adquieran los conceptos teóricos básicos sobre los que se fundamentan los diferentes métodos de cálculo de modelización molecular disponibles y que, a lo largo del curso, vayan formando el criterio necesario para seleccionar el método más apropiado para resolver un problema concreto y, además, saquen el máximo partido a los recursos (hardware y software) de que dispongan.

Los capítulos primero y segundo del programa se centran en la aplicación de los fundamentos de la mecánica cuántica y en la teoría del funcional de la densidad para resolver problemas prácticos. En ambos casos se estructura la materia en tres niveles, empezando con la capacidad de los diferentes métodos para asociar una energía a cualquier disposición espacial de los diferentes átomos del sistema que se pretende estudiar, permitiendo al usuario determinar los cambios de energía asociados a las diferentes posiciones de los átomos integrantes. En un segundo nivel, se aborda el cálculo en si mismo, mediante la optimización de geometrías. En el tercer nivel, se analizan los resultados de los cálculos tanto para evaluar las propiedades como para comprobar que se han llevado a cabo correctamente.

Guía docente

El tercer capítulo se centra en la resolución de problemás prácticos mediante el uso de técnicas computacionales. Se le da al alumno la posibilidad de investigar de forma teórica cualquier aspecto de su trabajo final de máster para de este modo incentivar su interés por la asignatura.

El curso ha sido diseñado a partir del trabajo que el profesor responsable vienen desarrollando dentro del grupo de investigación de Química Supramolecular de la UIB.

Requisitos

Esenciales

Tener conocimientos básicos de Química Cuántica y Química Orgánica.

Recomendables

Tener conocimientos básicos de Química Física Orgánica.

Competencias

Específicas

- * No tiene competencias específicas

Genéricas

- * Capacidad de abstracción, análisis y síntesis (G1)
- * Compromiso ético, con la calidad y con la preservación del medio ambiente (G2)
- * Habilidades para buscar, procesar y analizar información procedente de fuentes diversas (G3)

Básicas

- * Se pueden consultar las competencias básicas que el estudiante tiene que haber adquirido al finalizar el máster en la siguiente dirección: http://estudis.uib.cat/es/master/comp_basiques/

Contenidos

Contenidos temáticos

Unidad 1. Química cuántica

a) Métodos en Mecánica Cuántica: Introducción. Mecánica Cuántica. Átomos monoeléctricos. Átomos polielectricos y moléculas. El método Hartree-Fock. Funciones de base. Correlación electrónica.

b) Geometrías, Energías y Propiedades: Métodos de minimización de la energía potencial y de su derivada: Determinación de geometrías. Exploración de las superficies de energía potencial: mínimos de energía y estados de transición. Propiedades moleculares: potenciales de ionización, afinidades electrónicas. Frecuencias vibracionales y propiedades termodinámicas:

Guía docente

entropías, efectos isotópicos, correcciones debidas a la energía vibracional en el punto cero (ZPE). Propiedades electrónicas: momentos dipolares y distribución de carga molecular.

c) Aplicaciones de las diferentes teorías al estudio de propiedades de moléculas orgánicas y de su reactividad. Utilización del programa SPARTAN.

Unidad 2. Teoría del funcional de la densidad

a) Utilización de métodos DFT para resolver problemas prácticos. Cálculo de perfiles de reacción. Caracterización de estados de transición.

b) Aplicaciones seleccionadas de cálculos basados en la Teoría del Funcional de la Densidad al estudio teórico de la estructura electrónica y la reactividad de moléculas orgánicas. Utilización del programa SPARTAN.

Unidad 3. Resolución Problemas Prácticos

a) Mediante los conocimientos adquiridos en las Unidades 1 y 2, el alumno deberá resolver con la ayuda guiada del profesor un problema nuevo que pueda incluso derivar en una publicación científica.

b) Como alternativa al punto a), se aplicarán los conocimientos adquiridos en las unidades 1 y 2 para resolver problemas relacionados con el propio trabajo fin de Máster del Alumno

Metodología docente

Actividades de trabajo presencial (1,44 créditos, 36 horas)

Modalidad	Nombre	Tip. agr.	Descripción	Horas
Clases teóricas	Clases magistrales (A1)	Grupo grande (G)	Mediante el método expositivo el profesor establecerá los fundamentos teóricos de las unidades didácticas que componen la materia. Además se dará información sobre el método de trabajo aconsejable y el material didáctico que habrá de utilizar el alumnado para preparar de forma autónoma los contenidos (M1)	6
Seminarios y talleres	Seminarios presenciales (A2)	Grupo mediano (M)	Mediante el método de resolución de ejercicios y problemas el alumno pondrá en práctica los procedimientos y técnicas expuestos en las clases teóricas (M9)	28
Evaluación	Pruebas orales (A3)	Grupo grande (G)	El estudiante dispondrá de material didáctico específico para preparar el contenido de la exposición y el asesoramiento del profesorado. El profesorado y el resto del alumnado realizarán preguntas al finalizar la exposición que ayudarán a la evaluación de la actividad	2

Al inicio del semestre estará a disposición de los estudiantes el cronograma de la asignatura a través de la plataforma UIBdigital. Este cronograma incluirá al menos las fechas en las que se realizarán las pruebas de evaluación continua y las fechas de entrega de los trabajos. Asimismo, el profesor o la profesora informará a los estudiantes si el plan de trabajo de la asignatura se realizará a través del cronograma o mediante otra vía, incluida la plataforma Aula Digital.

Guía docente

Actividades de trabajo no presencial (4,56 créditos, 114 horas)

Modalidad	Nombre	Descripción	Horas
Estudio y trabajo autónomo individual	Análisis crítico de un trabajo científico (A8)	El alumno realizará un informe escrito en el que deberá analizar críticamente un trabajo científico asignados individualmente (M2)	40
Estudio y trabajo autónomo individual	Preparación de las exposiciones orales (A12)	Cada alumno tendrá dos semanas para preparar la exposición oral del tema asignado.	74

Riesgos específicos y medidas de protección

Las actividades de aprendizaje de esta asignatura no conllevan riesgos específicos para la seguridad y salud de los alumnos y, por tanto, no es necesario adoptar medidas de protección especiales.

Evaluación del aprendizaje del estudiante

Fraude en elementos de evaluación

De acuerdo con el artículo 33 del Reglamento Académico, "con independencia del procedimiento disciplinario que se pueda seguir contra el estudiante infractor, la realización demostrablemente fraudulenta de alguno de los elementos de evaluación incluidos en guías docentes de las asignaturas comportará, a criterio del profesor, una minusvaloración en su calificación que puede suponer la calificación de «suspense 0» en la evaluación anual de la asignatura".

Pruebas orales (A3)

Modalidad	Evaluación
Técnica	Pruebas orales (no recuperable)
Descripción	El estudiante dispondrá de material didáctico específico para preparar el contenido de la exposición y el asesoramiento del profesorado. El profesorado y el resto del alumnado realizarán preguntas al finalizar la exposición que ayudarán a la evaluación de la actividad
Criterios de evaluación	Eficacia del formato de presentación para la comprensión de la materia. Adecuación del ritmo de exposición. Adecuación del orden de los contenidos. Claridad de la exposición para la comprensión de la materia. Grado de preparación de la materia para la exposición (EV12)

Porcentaje de la calificación final: 50%

Guía docente

Análisis crítico de un trabajo científico (A8)

Modalidad	Estudio y trabajo autónomo individual
Técnica	Trabajos y proyectos (recuperable)
Descripción	El alumno realizará un informe escrito en el que deberá analizar críticamente un trabajo científico asignados individualmente (M2)
Criterios de evaluación	Se evaluará la utilización de conceptos y procedimientos propios de la materia, así como las aportaciones personales que reflejen la adquisición de las competencias básicas y generales de la materia (EV13). También se evaluará la presentación de los informes de acuerdo con la calidad y estructura de un trabajo científico.

Porcentaje de la calificación final: 50%

Recursos, bibliografía y documentación complementaria

Bibliografía básica

Leach, Andrew R.
Molecular modelling: principles and applications /Andrew R. Leach.
2nd Ed. Harlow, England; New York: Prentice Hall, 2001.
Cramer, Christopher J.
Essentials of computational chemistry: Theories and models /Christopher J. Cramer.
West Sussex, England: J. Wiley, c2002.

Bibliografía complementaria

Ragué Schleyer, Paul von.
Encyclopedia of computational chemistry /editor-in-chief, Paul von Ragué Schleyer.
Chichester: John Wiley,c1998.
Parr, Robert G.
Density-functional theory of atoms and molecules /Robert G. Parr and Weitao Yang.
New York :Oxford University Press;Oxford :Clarendon Press,1989.
Modern density functional theory: a tool for chemistry /edited by J.M. Seminario, P. Politzer.
Amsterdam; Oxford: Elsevier, 1995.
Chemical applications of density-functional theory /ed., Brian B. Laird, Richard B. Ross, Tom Ziegler.
Washington, DC :American Chemical Society,1996.