

Identificació de l'assignatura

Assignatura	21439 - Disseny Molecular
Crèdits	2.4 presencials (60 hores) 3.6 no presencials (90 hores) 6 totals (150 hores).
Grup	Grup 1, 1S(Campus Extens)
Període d'impartició	Primer semestre
Idioma d'impartició	Català

Professors

Professors	Horari d'atenció alumnat					
	Hora d'inici	Hora de fi	Dia	Data d'inici	Data de fi	Despatx
Juan Frau Munar juan.frau@uib.es	16:00h	17:00h	Dilluns	24/09/2012	30/06/2013	QF108

Titulacions on s'imparteix l'assignatura

Titulació	Caràcter	Curs	Estudis
Grau de Química	Optativa	Quart curs	Grau

Contextualització

La asignatura de Diseño Molecular es una optativa del grado de Química. En ella se introducirán aquellas metodologías teóricas (Mecánica Cuántica, Simulaciones de Dinámica Molecular, etc.) que constituyen actualmente una herramienta complementaria a las diferentes técnicas experimentales. La asignatura se plantea de forma dinámica de manera que los fundamentos teóricos puedan ser aplicados haciendo uso del software adecuado.

La asignatura está incluida dentro del Proyecto Campus Extens de la Universitat de les Illes Balears.

Requisits

Competències

Las competencias genéricas y específicas que se describen a continuación son las que se atribuyen a la asignatura en el contexto del Plan de Estudios del Grado en Química.



Específiques

1. CE2-H. Demostrar habilidades para identificar y resolver problemas cualitativos y cuantitativos con un enfoque estratégico..
2. CE5-H. Demostración inicial de habilidades para planificar, diseñar y ejecutar experimentos químicos..
3. CE1-H. Demostrar conocimiento y su comprensión para la aplicación práctica de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías de la Química..

Genèriques

1. CT-1. Capacidad de comunicación (oral y escrita) en lengua oficial y en inglés..
2. CT-3. Capacidad para la gestión de datos y la generación de información/conocimiento (uso eficaz y eficiente de las TICs y otros recursos)..
3. CT-5. Capacidad de resolución eficaz y eficiente de problemas demostrando principios de originalidad y autodirección..
4. CT-10. Conocimiento de los principios y hábitos de la investigación científico-técnica..

Continguts

El desarrollo de los contenidos en temas concretos obedece a la descripción de contenidos mínimos establecidos en el Plan de Estudios del Grado de Química.

Continguts temàtics

Tema 1. Visualización y construcción de sistemas moleculares.

Tema 2. Bases de datos

Cambridge Structural Database. Protein Data Bank

Tema 3. Mecánica Molecular

Bases de la Mecánica Molecular. Campos de Fuerza y tipos. Aplicaciones y limitaciones de la Mecánica Molecular.

Tema 4. Química Cuántica. Método de Hartree-Fock

Introducción a la Mecánica cuántica. El método Hartree-Fock. Funciones de base. Limitaciones de los métodos de Hartree-Fock

Tema 5. Correlación Electrónica

Correlación electrónica. Métodos Möller-Plesset y de interacción de configuraciones. Método del Funcional de la Densidad

Tema 6. Propiedades Moleculares

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

Tema 7. Aplicaciones

Aplicaciones de las diferentes teorías al estudio de sistemas moleculares. Utilización del programa Gaussian 03.

Tema 8. Técnicas de Simulación

Introducción a la Dinámica Molecular. Condiciones de una simulación. Metodología.
Aplicaciones. Métodos de MonteCarlo

Metodologia docent

En este apartado se definen las actividades a realizar.

Activitats de treball presencial

Modalitat	Nom	Tip. agr.	Descripció
Classes teòriques	Clases de teoría	Grup gran (G)	Clases en las que se transmitirán los conocimientos teóricos necesarios de la asignatura.
Seminaris i tallers	Aplicaciones prácticas	Grup mitjà (M)	Uso del software para estudiar algunos sistemas moleculares. Se trata de un actividad dinámica en la que el estudiante debe aprender a generar los inputs e interpretar los outputs.
Altres	Presentación oral de una de las actividades propuestas	Grup mitjà (M)	Una de las prácticas será expuesta seguiendo un esquema similar a las presentaciones orales en los congresos. Exposición de unos 15 minutos y posterior debate con el profesor y restantes estudiantes.

Activitats de treball no presencial

Modalitat	Nom	Descripció
Estudi i treball autònom individual o en grup	Informes de prácticas	Elaboración de informes sobre los problemas planteados.

Riscs específics i mesures de protecció

Les activitats d'aprenentatge d'aquesta assignatura no comporten riscs específics per a la seguretat i salut de l'alumnat i, per tant, no cal adoptar mesures de protecció especials.

Estimació del volum de treball

Modalitat	Nom	Hores	ECTS	%
Activitats de treball presencial		60	2.4	40
Classes teòriques	Clases de teoría	25	1	16.67
Seminaris i tallers	Aplicaciones prácticas	30	1.2	20
	Total	150	6	100



Modalitat	Nom	Hores	ECTS	%
Altres	Presentación oral de una de las actividades propuestas	5	0.2	3.33
Activitats de treball no presencial		90	3.6	60
Estudi i treball autònom individual o en grup	Informes de prácticas	90	3.6	60
		Total	150	6
				100

A començament del semestre hi haurà a disposició dels estudiants el cronograma de l'assignatura a través de la plataforma UIBdigital. Aquest cronograma inclourà almenys les dates en què es faran les proves d'avaluació contínua i les dates de lliurament dels treballs. A més, el professor o la professora informarà els estudiants si el pla de treball de l'assignatura es durà a terme a través del cronograma o per una altra via, inclosa la plataforma Campus Extens.

Avaluació de l'aprenentatge dels estudiants

Aplicaciones prácticas

Modalitat	Seminaris i tallers
Tècnica	Tècniques d'observació (No recuperable)
Descripció	Uso del software para estudiar algunos sistemas moleculares. Se trata de un actividad dinámica en la que el estudiante debe aprender a generar los inputs e interpretar los outputs.
Criteris d'avaluació	La asistencia a estas sesiones prácticas son obligatorias. Durante ellas se evaluará el grado de participación del estudiante.

Percentatge de la qualificació final: 20% per l'itinerari A

Presentación oral de una de las actividades propuestas

Modalitat	Altres
Tècnica	Proves d'execució de tasques reals o simulades (No recuperable)
Descripció	Una de las prácticas será expuesta siguiendo un esquema similar a las presentaciones orales en los congresos. Exposición de unos 15 minutos y posterior debate con el profesor y restantes estudiantes.
Criteris d'avaluació	Presentación oral (15 minutos) y posterior debate de una de las prácticas. Se valorará la capacidad de síntesis del estudiante, la adecuación de la presentación y el manejo en las respuestas a las preguntas.

Percentatge de la qualificació final: 20% per l'itinerari A



Informes de prácticas

Modalitat	Estudi i treball autònom individual o en grup
Tècnica	Informes o memòries de práctiques (No recuperable)
Descripció	Elaboración de informes sobre los problemas planteados.
Criteris d'avaluació	Constituye la actividad fundamental en la que se valorará cómo el estudiante afronta la resolución de un problema real. El plagio de uno o más informes comportará que esta actividad sea evaluada con un cero.

Percentatge de la qualificació final: 60% per l'itinerari A

Recursos, bibliografia i documentació complementària

Bibliografia bàsica

Química Teórica y Computacional. J. Andrés y J. Beltrán (eds). Pub. Universitat Jaume I, Castellón (2000)
Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models (2nd edition). C.J. Cramer. Wiley, Chichester (2007)
Química Cuántica. J. Bertrán, V. Branchadell, M. Moreno, M. Sodupe, Síntesis, Madrid (2002)
Quantum Chemistry (6th edition). I.N. Levine, Pearson Prentice-Hall (2009)
(Existe traducción española de la 5^a ed. : "Química Cuántica", PrenticeHall, Madrid, 2001).

Bibliografia complementària

Altres recursos

Presentaciones power point disponibles en Campus Extens.
Artículos científicos relacionadas con las actividades a realizar.
Manual on-line del software.

