

PLAN DOCENTE DE ASIGNATURA

CÓDIGO NOMBRE

Asignatura	206044	MODELIZACIÓN MOLECULAR
Titulación	0206	LICENCIATURA EN QUÍMICA
Departamento	C127	QUIMICA FISICA
Curso	-	
Duración (A: Anual, 1Q/2Q)	1Q	
Créditos ECTS	5,4	

Créditos
Teóricos 3

Créditos
Prácticos 3

Tipo Optativa

ASIGNATURA OFERTADA SIN DOCENCIA.

Profesores	Cat. Dr. D. DANIEL ESCOLAR MÉNDEZ
Objetivos	<p>El objetivo que se alcanzará es: La utilización y aplicación de la Modelización Molecular.</p> <p>Para ello se desarrollarán diversas aplicaciones prácticas orientadas a:</p> <ul style="list-style-type: none"> * Obtención de datos moleculares: estructurales, termodinámicos, cinéticos, ... <p>Y algunos métodos de cálculo cuando estos datos no estén disponibles en la bibliografía o en Internet.</p> <ul style="list-style-type: none"> * La utilización de programas de Modelización Molecular. Obtención de valores, su análisis e interpretación. * Diseño de moléculas inorgánicas y orgánicas, tanto sencillas como macromoléculas. Aplicación a la

Código Seguro de verificación:GB2B1QBByN0BMuCr1yz7QQ==. Permite la verificación de la integridad de una copia de este documento electrónico en la dirección: <https://verificarfirma.uca.es>
Este documento incorpora firma electrónica reconocida de acuerdo a la Ley 59/2003, de 19 de diciembre, de firma electrónica.

FIRMADO POR	MARIA DEL CARMEN JAREÑO CEPILLO	FECHA	13/07/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	1/8



GB2B1QBByN0BMuCr1yz7QQ==

	<p>determinación de datos moleculares: estructurales, conformacionales, energéticos, de enlace (orbitales moleculares) y de reactividad.</p> <p>* Utilización de Dinámica Molecular. Simulación de reacciones químicas.</p> <p>* Aplicación de las propiedades moleculares en razonamientos de reactividad química. Empleo de ejemplos concretos.</p>
Programa	<p>De acuerdo con los objetivos:</p> <p>I.- FUNDAMENTOS:</p> <p>0.- Introducción a la asignatura: sus características propias y diferentes de otras. Metodología. Programa.</p> <p>A) PROPIEDADES MOLECULARES</p> <p>1.- Constantes químico-físicas. Bases de datos. Valores usuales y relaciones entre ellas: Distancias y ángulos de enlace. Momentos de inercia. Constantes de fuerza. Energía de enlace. Momentos dipolares. Constante dieléctrica. Refractividad molar. Otras.</p> <p>2.- Obtención de magnitudes termodinámicas. Métodos de adición. Resultados de Mecánica Estadística.</p> <p>3.- Conformación. Barreras de rotación. Relación de Maxwell-Boltzmann. Abundancia relativa.</p> <p>4.- Interacción no enlazante. Expresiones para obtener fuerzas inter e intramoleculares.</p> <p>B) MODELIZACIÓN MOLECULAR APLICADA</p> <p>5.- Datos conformacionales muy aceptables para moléculas grandes: Mecánica Molecular. Fundamentos del método. Minimización de la energía. Magnitudes</p>

Código Seguro de verificación:GB2B1QBBYn0BMuCr1yz7QQ==. Permite la verificación de la integridad de una copia de este documento electrónico en la dirección: <https://verificarfirma.uca.es>
Este documento incorpora firma electrónica reconocida de acuerdo a la Ley 59/2003, de 19 de diciembre, de firma electrónica.

FIRMADO POR	MARIA DEL CARMEN JAREÑO CEPILLO	FECHA	13/07/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	2/8



GB2B1QBBYn0BMuCr1yz7QQ==

	<p>termodinámicas. Campos de fuerza diferentes. Obtención de datos de un programa de Mecánica Molecular. Aplicaciones. Limitaciones.</p> <p>6.- Utilización de la Dinámica molecular. Métodos usuales. Aplicaciones. Interpretación de los resultados de los programas.</p> <p>7.- Información que proporcionan los Orbitales Moleculares: Aplicación de conceptos. De Orbitales Atómicos a Orbitales Moleculares. Orbitales de grupo.</p> <p>8.- Parámetros moleculares que proporcionan los métodos empíricos sobre Orbitales Moleculares. Orden de enlace, densidad de carga. Obtención de datos de un programa de cálculo. Aplicaciones. Limitaciones. Su extensión.</p> <p>9.- Hasta dónde son buenos los resultados de los métodos semiempíricos. Tipos de métodos. Posibilidades. Limitaciones. Comparación de resultados entre distintos métodos y con métodos ab-initio. Información obtenible de estos resultados. Interpretación de diferentes representaciones gráficas de datos moleculares.</p> <p>10.- Los resultados que tardan más tiempo en obtenerse: Métodos ab-initio. Su lenguaje: las bases mínimas, otras Bases. Aplicaciones. Programas usuales. Interpretación, utilización y aplicación de resultados de un programa.</p> <p>C) RELACIÓN ENTRE PROPIEDADES MOLECULARES Y TENDENCIA A REACCIONAR</p> <p>11.- Utilización de descriptores fisicoquímicos. Descriptores Electrónicos. Estéricos. Hidrofóbicos. Ejemplos de utilización.</p> <p>12.- Relación entre reactividad y</p>
--	--

Código Seguro de verificación:GB2B1QBBYNOBMuCr1yz7QQ==. Permite la verificación de la integridad de una copia de este documento electrónico en la dirección: <https://verificarfirma.uca.es>
Este documento incorpora firma electrónica reconocida de acuerdo a la Ley 59/2003, de 19 de diciembre, de firma electrónica.

FIRMADO POR	MARIA DEL CARMEN JAREÑO CEPILLO	FECHA	13/07/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	3/8
			
GB2B1QBBYNOBMuCr1yz7QQ==			

	<p>Orbitales Moleculares. Orbitales Frontera. Relación entre actividad (biológica) y propiedades fisicoquímicas. Métodos utilizados.</p> <p>* * * * *</p> <p>II.- DESARROLLO PRÁCTICO:</p> <p>Se realizarán varias prácticas de los tipos:</p> <p>0) Búsqueda de datos. I) Construcción y diseño de estructuras moleculares. Moléculas sencillas y macromoléculas. II) Manejo de diferentes métodos de Modelización Molecular. Elección de variables. III) Obtención de propiedades: A) Energía conformacional. B) Niveles de energía. C) Orbitales Moleculares. D) Espectros de Vibración E) Espectros electrónicos. IV) Simulación de utilización de un disolvente y su comparación con resultados simulando fase gaseosa. Presencia de enlace de hidrógeno. V) Dinámica Molecular. VI) Reactividad.</p>
Actividades	<p>* Desarrollo de ejemplos de aplicación práctica y revisión o explicación de conceptos previos poco claros. * Discusión de puntos dudosos y resolución de ejercicios numéricos. * Empleo de ordenadores con programas apropiados: medios de cálculo y utilización de recursos de la WWW. * Realización del programa de prácticas complementado por las sugerencias y orientaciones de los alumnos o incluso reorientado por su interés en algún tema concreto que le ayude en su formación. * Evaluación de los conocimientos adquiridos por los alumnos.</p>

Código Seguro de verificación:GB2B1QBByN0BMuCr1yz7QQ==. Permite la verificación de la integridad de una copia de este documento electrónico en la dirección: <https://verificarfirma.uca.es>
Este documento incorpora firma electrónica reconocida de acuerdo a la Ley 59/2003, de 19 de diciembre, de firma electrónica.

FIRMADO POR	MARIA DEL CARMEN JAREÑO CEPILLO	FECHA	13/07/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	4/8



GB2B1QBByN0BMuCr1yz7QQ==

Metodología	<p>Dada la la carencia total de obras publicadas en español sobre Modelización Molecular, se seguirá una metodología con orientación de tipo presencial, con una pedagogía que mantenga un ambiente distendido. Por ello:</p> <p>* Se hará una exposición y desarrollo de diversos temas del programa. Se harán cuantas aclaraciones sean necesarias tanto en el momento de la explicación como en las horas de tutoría, cuyo horario es flexible. En algunas sesiones se plantearán preguntas y cuestiones, tanto para profundizar en el conocimiento del temario como para evaluar el nivel de estudio y comprensión del mismo.</p> <p>* Se propondrán ejercicios numéricos de todos los puntos del programa que presentan usualmente mayor dificultad. Discutiéndose y resolviéndose todos los ejercicios.</p> <p>* Una parte importante del tiempo lectivo de la asignatura se desarrollará en forma práctica en los ordenadores disponibles. Se realizará un entrenamiento previo sobre búsqueda de datos y manejo de un programa típico de Modelización Molecular. Posteriormente se desarrollarán diferentes ejemplos y aplicaciones que complementarán la exposición teórica.</p> <p>* Se seguirá muy de cerca la participación e implicación en la asignatura y se tendrán en cuenta propuestas de variación en el contenido y extensión de algunos temas del programa según la orientación de los alumnos. Así mismo, se prestará atención a la posibilidad de desarrollar algunos temas, que aún no figurando en el programa, estén relacionados con la asignatura.</p>
-------------	--

Código Seguro de verificación:GB2B1QBByN0BMuCr1yz7QQ==. Permite la verificación de la integridad de una copia de este documento electrónico en la dirección: <https://verificarfirma.uca.es>
Este documento incorpora firma electrónica reconocida de acuerdo a la Ley 59/2003, de 19 de diciembre, de firma electrónica.

FIRMADO POR	MARIA DEL CARMEN JAREÑO CEPILLO	FECHA	13/07/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	5/8



GB2B1QBByN0BMuCr1yz7QQ==

<p>Criterios y sistemas de evaluación</p>	<p> Todos los alumnos matriculados en la asignatura tendrán la posibilidad de presentarse a la convocatoria que les corresponda. La evaluación en la convocatoria Ordinaria y en las Extraordinarias se basará en una prueba escrita que constará previsiblemente de varias cuestiones y de varios problemas numéricos; alguna de las cuestiones será en forma de test. El tiempo previsible de realización no superará las 3 horas. En caso de fuerza mayor o si alguien así lo solicita, cualquiera de las pruebas anteriores será oral y su duración se adaptará al tipo de evaluación. En alguna de estas evaluaciones se podrá emplear un formulario con constantes y fórmulas fundamentales (todos los alumnos el mismo modelo preparado de antemano). </p> <p> Los alumnos podrán completar su formación mediante el desarrollo de trabajos relacionados con la asignatura, que se calificarán según su originalidad, ingenio y tiempo que se estime (o demuestre) que ha dedicado a ello. </p> <p> En la calificación final, además del resultado de las evaluaciones se tendrá en cuenta la labor realizada por el alumno a lo largo del curso, su asistencia y participación, su esfuerzo docente, la resolución de ejercicios numéricos, su implicación en el programa práctico, los resultados obtenidos y la claridad de exposición. </p>
<p>Recursos bibliográficos</p>	<p>Algunos aspectos de temas del programa se tratan en textos de química de diferentes asignaturas de la licenciatura en Química, por ello, esta</p>

Código Seguro de verificación:GB2B1QBByN0BMuCr1yz7QQ==. Permite la verificación de la integridad de una copia de este documento electrónico en la dirección: <https://verificarfirma.uca.es>
 Este documento incorpora firma electrónica reconocida de acuerdo a la Ley 59/2003, de 19 de diciembre, de firma electrónica.

FIRMADO POR	MARIA DEL CARMEN JAREÑO CEPILLO	FECHA	13/07/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	GB2B1QBByN0BMuCr1yz7QQ==	PÁGINA 6/8
 GB2B1QBByN0BMuCr1yz7QQ==			

bibliografía utilizable se irá indicando a medida que se avance en cada tema.
Además en la biblioteca puede consultarse alguno de los siguientes textos:

- Molecular Dynamics Simulations: Elementary Methods, por J.M. Haile; editorial Wiley, New York.(1992).

- Molecular Modelling for Beginners, por Alan Hinchliffe; editorial Wiley and Sons incorporated Barnes and Noble; rústica, 410pág. 2003; ISBN: 0470843101.

- A Guide to Molecular Mechanics and Quantum Chemical Calculations; W.J. Hehre; Wavefunction, Inc., Irvine, CA, 2003 ; rústica 796 págs (contiene un CD); ISBN 1-890661-18-X.

- The Molecular Modeling Workbook for Organic Chemistry (Full Color); W.J. Hehre, A.J. Shusterman, J.E. Nelson; Wavefunction, Inc., Irvine, CA, 1998; rústica, ISBN 1-890661-06-6.

- Molecular Modelling: Principles and Applications, por Andrew R. Leach; editorial Prentice Hall, segunda edición 2001, ISBN 0582382106.

- Molecular Modeling for Chemists and Biological Chemists; Tamara Gund; CRC Press, 2002, 320 págs.; ISBN: 0849316960.

- Molecular Modeling and Simulation: An Interdisciplinary Guide. por Tamar Schlick; editorial Springer Verlag, New York 2002; ISBN 0-387-95404-X (Biomoléculas).

- Molecular Modeling: Basic Principles and Applications; por Hans-Dieter Höltje, Wolfgang Sippl, Didier Rognan, Gerd Folkers; segunda edición 2003; editorial Wiley, ISBN: 3-527-30589-

Código Seguro de verificación:GB2B1QBBYNOBMuCr1yz7QQ==. Permite la verificación de la integridad de una copia de este documento electrónico en la dirección: <https://verificarfirma.uca.es>
Este documento incorpora firma electrónica reconocida de acuerdo a la Ley 59/2003, de 19 de diciembre, de firma electrónica.

FIRMADO POR	MARIA DEL CARMEN JAREÑO CEPILLO	FECHA	13/07/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	7/8



GB2B1QBBYNOBMuCr1yz7QQ==

0. (Dedicado a proteínas).

- Molecular Modeling of Inorganic Compounds; por Peter Comba, Trevor W. Hambley; editorial Wiley-VCH Verlag GmbH; segunda edición, 2001; ISBN: 3-527-29915-7.

- Molecular Modeling and Simulation: An Interdisciplinary Guide. por Tamar Schlick; editorial Springer Verlag, New York 2002; ISBN 0-387-95404-X.

- Guidebook on Molecular Modeling in Drug Design. editado por N. C. Cohen; editorial Academic Press: New York. 1996; ISBN 0-12-17824-5.

- Molecular Modeling on the PC, por Matthew Schlecht; editorial Wiley-VCH; 1998; ISBN: 0471185671. (Casi sólo Mecánica Molecular y un único tipo de programa).

- Fundamental Principles of Molecular Modeling; por W. Gans, Anton Amann, Jan C. A. Boeyens, Werner Gans, A. Amann, J. C. A. Boeyens; Editor W. Gans, editorial Plenum Publishing Corporation; 1996; ISBN: 03064530531996. (Son 13 capítulos cada uno por un autor).

Código Seguro de verificación:GB2B1QBBYNOBMuCr1yz7QQ==. Permite la verificación de la integridad de una copia de este documento electrónico en la dirección: <https://verificarfirma.uca.es>
Este documento incorpora firma electrónica reconocida de acuerdo a la Ley 59/2003, de 19 de diciembre, de firma electrónica.

FIRMADO POR	MARIA DEL CARMEN JAREÑO CEPILLO	FECHA	13/07/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	8/8



GB2B1QBBYNOBMuCr1yz7QQ==