

**TEMARIO TEÓRICO: MODELIZACIÓN MOLECULAR EN QUÍMICA**

PROGRAMA: Según los objetivos de la asignatura

0.- Introducción a la asignatura.

A) PROPIEDADES MOLECULARES

- 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.
- 2.- Cálculo de magnitudes termodinámicas. Métodos de adición. Resultados de Mecánica Estadística.
- 3.- Conformación. Barreras de rotación. Relación de Maxwell-Boltzmann. Abundancia relativa.
- 4.- Interacción no enlazante. Fuerzas inter e intra moleculares.

B) QUÍMICA COMPUTACIONAL APLICADA

- 5.- Mecánica Molecular: Fundamentos del método. Minimización de la energía. Magnitudes termodinámicas. Campos de fuerza diferentes. Obtención de datos de un programa de Mecánica Molecular. Aplicaciones. Limitaciones.
- 6.- Dinámica molecular. Fundamentos. Métodos usuales. Aplicaciones. Resultados de los programas.
- 7.- Revisión de conceptos de la teoría de Orbitales Moleculares. De Orbitales Atómicos a Orbitales Moleculares. Orbitales de grupo.
- 8.- Revisión de métodos empíricos sobre Orbitales Moleculares. Orden de enlace, densidad de carga, ... Obtención de datos de un programa de cálculo. Aplicaciones. Limitaciones. Extensión de los métodos empíricos. Ventajas y defectos. comparación de resultados con cálculos no extendidos.
- 9.- Métodos semiempíricos. Suposiciones. Fundamentos. Tipos de métodos. Posibilidades. Limitaciones.
- 10.- Comparación entre distintos métodos semiempíricos y con métodos ab-initio. Utilización de resultados. Información obtenible de un programa. Representaciones gráficas en ordenador de resultados.
- 11.- Métodos ab-initio. Suposiciones. Fundamentos. Bases mínimas. Otras Bases. Otros métodos. Limitaciones. Aplicaciones. Programas usuales. Utilización de resultados. Interpretación de datos de un programa.

C) RELACIÓN ENTRE PROPIEDADES MOLECULARES Y TENDENCIA A REACCIONAR

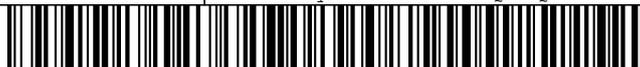
- 12.- Utilización de descriptores fisicoquímicos. Descriptores Electrónicos. Estéricos. Hidrofóbicos. Ejemplos de utilización.
- 13.- Reactividad y Orbitales Moleculares. Orbitales Frontera.
- 14.- Relación entre actividad (biológica) y propiedades fisicoquímicas. Métodos utilizados.

D) APLICACIONES

- 15.- Programas de Modelización Molecular. Características. Utilización.

Código Seguro de verificación: Mq49kKJkfTmXhVse4Qut8Q==. 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	29/05/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	1/3



Mq49kKJkfTmXhVse4Qut8Q==

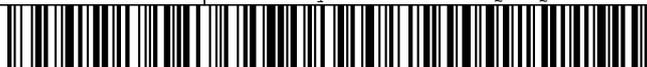
TEMARIO PRÁCTICO: MODELIZACIÓN MOLECULAR EN QUÍMICA

La mayoría del programa de la asignatura se desarrollara en forma práctica empleando un ordenador, en el que se desarrollarán diferentes ejemplos de modelización molecular, como construcción de estructuras; cálculos de propiedades: principalmente energía conformacional, niveles de energía, espectros, etc.; interacción con el disolvente, enlace de hidrógeno, reactividad, etc.

Campus Universitario de Puerto Real. Polígono Río San Pedro s/n.11510. Puerto Real (Cádiz). Spain. Tel: 34.956.016300 . Fax: 34.956.016288 E-Mail: ciencias@uca.es

Código Seguro de verificación: Mq49kKJkfTmXhVse4Qut8Q==. 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	29/05/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	2/3



Mq49kKJkfTmXhVse4Qut8Q==



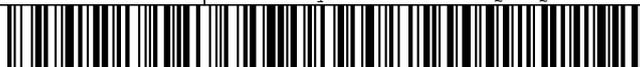
BIBLIOGRAFÍA: MODELIZACIÓN MOLECULAR EN QUÍMICA

Debido a la naturaleza de la asignatura, la bibliografía utilizable se irá obteniendo a medida que se avance en cada tema.

Campus Universitario de Puerto Real, Polígono Río San Pedro s/n.11510, Puerto Real (Cádiz), Spain. Tel: 34.956.016300 . Fax: 34.956.016288 E-Mail: ciencias@uca.es

Código Seguro de verificación: Mq49kKJkfTmXhVse4Qut8Q==. 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	29/05/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	3/3



Mq49kKJkfTmXhVse4Qut8Q==