

## Guia docent

### Identificació de l'assignatura

|                             |                               |
|-----------------------------|-------------------------------|
| <b>Assignatura / Grup</b>   | 21439 - Disseny Molecular / 1 |
| <b>Titulació</b>            | Grau de Química - Quart curs  |
| <b>Crèdits</b>              | 6                             |
| <b>Període d'impartició</b> | Segon semestre                |
| <b>Idioma d'impartició</b>  | Català                        |

### Professors

| Professor/a  | Horari d'atenció als alumnes  |            |     |              |            |                   |
|--|---|------------|-----|--------------|------------|-------------------|
|  | Hora d'inici  | Hora de fi | Dia | Data d'inici | Data de fi | Despatx / Edifici |
| Rodrigo Casasnovas Perera  |   |            |     |              |            |                   |
| <i>Responsable</i>   | Cal concertar cita prèvia amb el/la professor/a per a fer una tutoria |            |     |              |            |                   |
| <a href="mailto:rodrigo.casasnovas@uib.es">rodrigo.casasnovas@uib.es</a> |   |            |     |              |            |                   |

### Contextualització

La assignatura 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.

Una parte de la asignatura se impartirá en inglés, idioma que también se empleará en la realización de los trabajos a realizar por el alumnado.

### Requisits

### Competències

#### Específiques

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

## Guia docent

### Genèriques

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

### Bàsiques

- \* Podeu consultar les competències bàsiques que l'estudiant ha d'haver assolit en acabar el grau a l'adreça següent: [http://estudis.uib.cat/ca/grau/comp\\_basiques/](http://estudis.uib.cat/ca/grau/comp_basiques/)

### 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 09.

Tema 8. Técnicas de Simulación

## Guia docent

Introducció a la Dinàmica Molecular. Condicions de una simulació. Metodologia. Aplicacions. Mètodes de MonteCarlo

### Metodologia docent

En este apartado se definen las actividades a realizar.

#### Activitats de treball presencial (2,4 crèdits, 60 hores)

| Modalitat           | Nom  | Tip. agr.      | Descripció   | Hores |
|---------------------|--|----------------|--|-------|
| Classes teòriques   | Clases de teoria                                       | Grup gran (G)  | Clases en las que se transmitirán los conocimientos teóricos necesarios de la asignatura. Una parte de la asignatura se impartirá en inglés  | 25    |
| 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. Una parte se impartirá en inglés                    | 30    |
| Altres              | Presentación oral de una de las actividades propuestas | Grup mitjà (M) | 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. Una parte se realizará en inglés | 5     |

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 informará 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 Aula digital.

#### Activitats de treball no presencial (3,6 crèdits, 90 hores)

| Modalitat                                     | Nom                   | Descripció  | Hores |
|---|-----------------------|---|-------|
| Estudi i treball autònom individual o en grup | Informes de prácticas | Elaboración de informes sobre los problemas planteados. | 90    |

## Guia docent

### Riscs específics i mesures de protecció

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

### Avaluació de l'aprenentatge dels estudiants

#### Frau en elements d'avaluació

D'acord amb l'article 33 del Reglament acadèmic, "amb independència del procediment disciplinari que es pugui seguir contra l'estudiant infractor, la realització demostradorament fraudulenta d'algun dels elements d'avaluació inclosos en guies docents de les assignatures comportarà, a criteri del professor, una menysvaloració en la seva qualificació que pot suposar la qualificació de «suspens 0» a l'avaluació anual de l'assignatura".

#### Aplicaciones prácticas

|                      |  |
|----------------------|--|
| Modalitat            | Seminaris i tallers  |
| Tècnica              | Tècniques d'observació ( <b>no recuperable</b> )   |
| 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. Una parte se impartía en inglés |
| 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%

#### Presentación oral de una de las actividades propuestas

|                      |  |
|----------------------|--|
| Modalitat            | Altres   |
| Tècnica              | Proves d'execució de tasques reals o simulades ( <b>no recuperable</b> )   |
| 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. Una parte se realizará en inglés |
| 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: 30%



## Guia docent

### Informes de pràcticas

---

|                      |   |
|----------------------|---|
| Modalitat            | Estudi i treball autònom individual o en grup   |
| Tècnica              | Informes o memòries de pràctiques ( <b>no recuperable</b> )   |
| 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: 50%

### 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 5ª ed. : "Química Cuántica", PrenticeHall, Madrid, 2001).

#### Altres recursos

---

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

