



Asignatura: Modelización Molecular
Código: 32964
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Master en Química Aplicada
Nivel: Master
Tipo: Optativa
Nº. de Créditos: 4 ECTS

1. ASIGNATURA / COURSE TITLE

Modelización Molecular / [Molecular Modeling](#)

1.1. Código / Course number

32964

1.2. Materia / Content area

Química Molecular y Química de Materiales / [Molecular Chemistry and Materials Chemistry](#)

1.3. Tipo / Course type

Asignatura Optativa / [Optional subject](#)

1.4. Nivel / Course level

Master

1.5. Curso / Year

1º / 1st

1.6. Semestre / Semester

2º / 2nd

1.7. Idioma / Language

Español. Se emplea también Inglés en material docente / [In addition to Spanish, English is also extensively used in teaching material](#)

1.8. Requisitos previos / Prerequisites

Es recomendable tener conocimientos de Química Cuántica / [It is advisable basic training in Quantum Chemistry](#)

1.9. Requisitos mínimos de asistencia a las sesiones presenciales/ [Minimun attendance requirement](#)

La asistencia a las sesiones prácticas en ordenador de la asignatura es obligatoria / [Attendance to practical computing sessions is mandatory](#)



Asignatura: Modelización Molecular
Código: 32964
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Master en Química Aplicada
Nivel: Master
Tipo: Optativa
Nº. de Créditos: 4 ECTS

1.10. Datos del equipo docente / Faculty data

Coordinador:

Docente(s) / Lecturer(s): Alfredo Aguado Gómez
Departamento de Química Física Aplicada/ Department of Applied Physical Chemistry
Facultad de Ciencias / Faculty of Sciences
Despacho - Módulo / Office - Module: 14.504
Teléfono / Phone: +34 91 497 4954
Correo electrónico/Email: alfredo.aguado@uam.es
Página web/Website: <https://moodle.uam.es>
Horario de atención al alumnado/Office hours: Previa petición de hora

1.11. Objetivos del curso / Course objectives

El principal objetivo de la Modelización Molecular es aprender a utilizar los métodos que permiten el estudio teórico de sistemas de interés químico, utilizando para ello programas de cálculo de la estructura electrónica y propiedades moleculares.

En este aspecto, los objetivos que el estudiante debe alcanzar son:

- Saber aplicar varios métodos teóricos al estudio de la estructura electrónica y molecular.
- Obtener propiedades de interés químico utilizando dichos métodos.
- Manejar programas de cálculo de la estructura y propiedades moleculares.
- Aprender a seleccionar el método de cálculo adecuado para cada problema de interés químico, como puede ser el estudio de propiedades moleculares o la reactividad química.
- Aprender a interpretar los resultados obtenidos y extraer conclusiones que nos permitan tanto interpretar resultados experimentales como predecir algunas propiedades en estudio.

Estos resultados de aprendizaje se enmarcan y contribuyen a la adquisición de las siguientes competencias del Master:

COMPETENCIAS BÁSICAS:

- CB6: Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación.
- CB7: Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.
- CB8: Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo



Asignatura: Modelización Molecular
Código: 32964
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Master en Química Aplicada
Nivel: Master
Tipo: Optativa
Nº. de Créditos: 4 ECTS

incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios.

- CB9: Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades.
- CB10: Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.

COMPETENCIAS GENERALES:

- CG1: Ser capaz de reconocer y analizar nuevos problemas químicos y plantear estrategias para solucionarlos.
- CG3: Ser capaz de analizar situaciones complejas, plantear soluciones y emitir valoraciones en algún campo de la Química.

COMPETENCIAS TRANSVERSALES:

- CT2: Conseguir habilidades para relacionar la información experimental con teorías adecuadas.
- CT4: Adquirir habilidad para la utilización de las tecnologías de la información y de la comunicación.

COMPETENCIAS ESPECÍFICAS:

- CE2: Ser capaz de interpretar los datos procedentes de observaciones y medidas realizadas en laboratorios avanzados y de investigación en términos de su significación y de las teorías que las sustentan.
- CE5: Ser capaz de investigar de forma autónoma en un campo de conocimiento químico específico o multidisciplinar.

1.12. Contenidos del programa / **Course contents**

El temario está organizado en dos partes. En una primera parte se estudian los fundamentos de los métodos de cálculo de la estructura molecular, haciendo especial énfasis en la elección del modelo a utilizar en cada caso. En la segunda parte se estudian diferentes casos prácticos, que se centrarán en el estudio de las propiedades de interés químico.

BLOQUES TEMÁTICOS

1. Métodos de cálculo de la estructura molecular. Elección de modelos.

2. Aplicaciones:

- 2.1. Cálculo de propiedades: geometría molecular, análisis de la densidad, propiedades termodinámicas, espectroscopia.
- 2.2. Dinámica molecular y reactividad, solvatación, macromoléculas.



Asignatura: Modelización Molecular
Código: 32964
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Master en Química Aplicada
Nivel: Master
Tipo: Optativa
Nº. de Créditos: 4 ECTS

1.13. Referencias de consulta / Course bibliography

- **Quantum Chemistry & Spectroscopy: International Edition.**
Thomas Engel. Pearson Higher Education, 2010 (2ª edición).
- **Applied Quantum Chemistry.**
G. Nagy-Szabo, R. Surjan and J.G. Angyan. Springer-Verlag, New York 2007.
- **Exploring Chemistry With Electronic Structure.**
James B. Foresman y AEleen Frisch. Gaussian Inc 1996. (2nd edition).
- **Algunos aspectos básicos de la química computacional.**
María Inés Nicolás Vázquez, Erick Marín Chiñas, Francisco Miguel Castro Martínez, René Miranda Ruvalcaba. UNAM, México (2006).
- **Química cuántica: fundamentos y aplicaciones computacionales.**
Joan Bertran Rusca, Vicenç Branchadell Gallo, Miquel Moreno Ferrer y Mariona Sodupe Roure, Síntesis, Madrid, 2000.

2. Métodos Docentes / Teaching methodology

Actividades Formativas:

PRESENCIALES: clases teóricas, clases prácticas en aula de informática, tutorías y realización de pruebas de evaluación (exposición de trabajos).

NO PRESENCIALES: estudio y trabajo autónomo individual, elaboración de memorias y preparación de la prueba de evaluación/trabajo.

Metodologías Docentes:

1. Clases teóricas.

Consiste en exposiciones realizadas por el profesor para que el estudiante conozca los conceptos teóricos que conforman los temas estudiados. Estas clases teóricas se realizarán de tal forma que se fomente la participación de los alumnos. Se tratan de sesiones expositivas en las que se desarrollarán los contenidos teóricos de las materias, intercalados con preguntas, ejercicios y otras actividades. Se fomentará la adquisición de las competencias CB6, CB7, CB10, CG1, CG3, CT2, CT4, CE2 y CE5.

2. Clases prácticas en aula de informática.

En las clases prácticas los estudiantes resolverán casos prácticos que le serán planteados por los profesores mediante el uso de herramientas informáticas. Se trabajarán las aplicaciones de los contenidos de las materias, incluyendo ejemplos numéricos, análisis de casos, búsqueda de datos, y trabajos dirigidos. Durante las sesiones en el aula de informática el estudiante tendrá que realizar distintos trabajos personalizados, repartidos a lo largo del semestre. El objetivo será que los alumnos adquieran las competencias CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CG1, CG3, CT2, CT4, CE2 y CE5.



Asignatura: Modelización Molecular
Código: 32964
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Master en Química Aplicada
Nivel: Master
Tipo: Optativa
Nº. de Créditos: 4 ECTS

3. Tutorías.

El profesor realizará tutorías individuales o con grupos reducidos sobre cuestiones puntuales que los estudiantes puedan plantear. Se trata de una atención personalizada a los estudiantes, donde el profesor atiende, facilita y orienta a uno o varios estudiantes en el proceso formativo. Permiten al profesor un seguimiento más individualizado del aprendizaje de cada estudiante. Se fomentará la adquisición de las competencias CE2 y CE5, entre otras.

4. Docencia en red.

Se utilizará las distintas herramientas que ofrece la plataforma moodle (<https://moodle.uam.es>). Publicación de contenidos de la asignatura, herramientas de trabajo en grupo: foros de discusión y wiki, correo electrónico, etc. Se fomentará la adquisición de las competencias CE2 y CE5.

3. Tiempo de trabajo del estudiante/ **Student workload**

| | | Nº de horas (porcentaje) |
|----------------------|-------------------------------------------------------------------------|--------------------------|
| Presencial | Clases teóricas | 10 h (10 %) |
| | Clases prácticas en aula de informática | 25 h (25 %) |
| | Tutorías | 10 h (10 %) |
| | Realización de pruebas de evaluación (exposición de trabajos) | 5 h (5 %) |
| | <i>Total presencial</i> | 50 h (50 %) |
| No presencial | Estudio y trabajo autónomo individual | 35 h (35 %) |
| | Elaboración de memorias, preparación de la prueba de evaluación/trabajo | 15 h (15 %) |
| | <i>Total no presencial</i> | 50 h (50 %) |
| TOTAL | | 100 h |

4. Métodos de evaluación y porcentaje en la calificación final / **Evaluation procedures and weight of components in the final grade**

CONVOCATORIA ORDINARIA

- El aprendizaje y la formación adquirida por el estudiante serán evaluados a lo largo de todo el curso, intentando que el estudiante avance de forma regular y constante en la asimilación de los contenidos de la asignatura.
- La nota final de la asignatura se basará en los ejercicios, trabajos y discusión de los mismos que se irá realizando durante el curso.
- El estudiante que haya participado en menos de un 20% de las actividades de evaluación, será calificado en la convocatoria ordinaria como “No evaluado”.



Asignatura: Modelización Molecular
Código: 32964
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Master en Química Aplicada
Nivel: Master
Tipo: Optativa
Nº. de Créditos: 4 ECTS

CONVOCATORIA EXTRAORDINARIA

- En la convocatoria extraordinaria se volverán a presentar, corregidos y mejorados, todos los ejercicios y trabajos de la evaluación ordinaria, y ello supondrá el 100% de la calificación.

En el cuadro se resume el sistema de evaluación:

| Sistema de Evaluación | Ponderación Convocatoria Ordinaria | Ponderación Convocatoria Extraordinaria |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------|-----------------------------------------|
| Realización de trabajos e informes escritos | 60% | 60% |
| Exposición oral de trabajos, informes etc. que han sido previamente preparados, incluyendo el debate con compañeros y profesores. | 40% | 40% |

5. Cronograma / Course calendar

| Bloque temático | Horas presenciales |
|-----------------------------------------------------------------------|--------------------|
| 1. Métodos de cálculo de la estructura molecular. Elección de modelos | 25 |
| 2. Aplicaciones | 25 |

Este cronograma tiene carácter orientativo. Los horarios se publican en la web del Máster: http://www.uam.es/ss/Satellite/Ciencias/es/1242650400756/1242651872339/estudio/detalle/Master_Universitario_en_Quimica_Aplicada.htm