



Guía Docente:

MODELIZACIÓN MOLECULAR Y MÉTODOS DE SIMULACIÓN



FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS
UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID
CURSO 2011-2012



I.- IDENTIFICACIÓN

NOMBRE DE LA ASIGNATURA:	Modelización Molecular y Métodos de Simulación
CARÁCTER:	Optativa
MATERIA:	Química Física Avanzada
MÓDULO:	Avanzado
TITULACIÓN:	Grado en Química
SEMESTRE/CUATRIMESTRE:	Primero (cuarto curso)
DEPARTAMENTO/S:	Química Física I

PROFESOR/ES RESPONSABLE/S:

Grupo A		
Teoría Seminario	Profesor: Departamento: Despacho: e-mail:	CARLOS VEGA DE LAS HERAS Química Física I QB-255 cvega@quim.ucm.es
Tutoría	Profesora: Departamento: Despacho: e-mail:	CHANTAL VALERIANI Química Física I QB-256 cvaleriani@quim.ucm.es
Laboratorio	Profesor: Departamento: Despacho: e-mail:	JOSÉ LUIS FERNÁNDEZ ABASCAL Química Física I QB-249 abascal@quim.ucm.es

II.- OBJETIVOS

■ OBJETIVO GENERAL

En esta asignatura se pretende dar a conocer al alumno las modernas técnicas utilizadas en química computacional. En particular se pretende dar una visión de los métodos de simulación y estructura electrónica para el cálculo de propiedades electrónicas, estructurales, termodinámicas y dinámicas de diferentes sistemas, tanto compuestos por moléculas aisladas como en fase condensada. Para la modelización y simulación de moléculas y sistemas químicos se manejarán programas informáticos, tanto comerciales como de acceso libre.

■ OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Desarrollar conceptos fundamentales y avanzados de la mecánica cuántica a través de sus aplicaciones.
- Introducir al alumno en la utilización práctica de los métodos aproximados que se utilizan en el cálculo de la estructura electrónica de las moléculas.



- Utilizar software de modelización molecular para optimizar geometrías y obtener propiedades moleculares y espectros vibracionales, electrónicos y de resonancia magnética nuclear.
- Desarrollar conceptos de termodinámica estadística a través de sus aplicaciones a diferentes sistemas moleculares y fases condensadas.
- Conocer el fundamento de los métodos de simulación por Monte Carlo y dinámica molecular.
- Utilizar software de modelización molecular para calcular propiedades termodinámicas, estructurales y dinámicas de sistemas moleculares y otros en fase condensada.

III.- CONOCIMIENTOS PREVIOS Y RECOMENDACIONES

■ CONOCIMIENTOS PREVIOS:

Conocimientos básicos de Química Cuántica y Termodinámica Estadística, adquiridos en el Módulo Fundamental del Grado en Química, o contenidos equivalentes de otras titulaciones.

■ RECOMENDACIONES:

Se recomienda haber superado las asignaturas del Módulo Básico, así como la *Química Física I* y *Química Física II* del Módulo Fundamental del Grado en Química, o contenidos equivalentes en otras titulaciones.

IV.- CONTENIDOS

■ BREVE DESCRIPCIÓN DE LOS CONTENIDOS:

Cálculo de la estructura electrónica. Métodos *ab initio*, semiempíricos y de funcional de densidad (DFT). Aplicaciones prácticas de los cálculos cuánticos. Moléculas y sólidos. Estructura, reactividad, propiedades termodinámicas y cinéticas. Fuerzas intermoleculares. Campos de fuerza. Mecánica molecular. Dinámica molecular. Métodos de Monte Carlo. Aplicaciones de la simulación molecular a la materia condensada: sólidos, líquidos y sistemas biológicos.

■ PROGRAMA:

TEMA I. Estructura electrónica

Lección 1: Ecuación de Schrödinger para moléculas.

Hamiltoniano molecular. Separación Born-Oppenheimer y Hamiltoniano electrónico. Aproximación orbital de la función de onda electrónica.

Lección 2: Ecuaciones de Hartree-Fock-Roothaan

Método variacional. Determinante de Slater. Método del campo autoconsistente. Hartree-Fock restringido y no restringido. El problema de la contaminación de espín. Combinación lineal de orbitales atómicos y ecuaciones de Roothaan.



Lección 3: Métodos semiempíricos

Método de Hückel extendido. Métodos CNDO, INDO y NDDO. Métodos MINDO, MNDO, AM1 y PM3. Ventajas y desventajas de los métodos semiempíricos.

Lección 4: Conjuntos de bases. Optimización de geometría

Orbitales tipo Slater (STO). Orbitales tipo Gausiano (GTO). Base mínima. Bases de valencia desdoblada. Funciones de polarización y difusas. Conjuntos de bases contraídas. Cálculo en un solo punto. Optimización de geometría.

Lección 5: Métodos de correlación electrónica

Interacción de configuraciones (CI). Métodos CI truncados. Teoría de perturbaciones Moller-Plesset (MP).

Lección 6: Funcionales de densidad (DFT)

Aproximaciones de densidad local. Aproximaciones de gradiente generalizado. Funcionales de intercambio y correlación. Funcionales híbridos. Ventajas e inconvenientes de los métodos DFT.

Lección 7: Análisis de la función de onda

Análisis de poblaciones en términos del conjunto de bases. Análisis de poblaciones basado en el potencial electrostático. Análisis de poblaciones basado en la función de onda. Método de átomos en moléculas.

Lección 8: Cálculo de propiedades I

Propiedades eléctricas y magnéticas: momento dipolar eléctrico y magnético, polarizabilidad. Propiedades espectroscópicas: frecuencias vibracionales, intensidades de absorción en infrarrojo, intensidades Raman. Apantallamiento magnético nuclear.

Lección 9: Cálculo de propiedades II

Curvas de energía potencial. Propiedades termodinámicas. Estabilidad relativa de isómeros. Análisis conformacional.

Lección 10: Aplicaciones a la reactividad química

Perfil de reacción y superficie de energía potencial. Determinación de coeficientes cinéticos. Procesos no adiabáticos. Teoría del estado de transición.

Lección 11: Teorías cualitativas

Teoría de orbitales frontera. Orbitales HOMO y LUMO. Correlación con velocidades de reacción. Reglas de Woodward-Hoffmann.

Lección 12: Estructura electrónica en sistemas multimoleculares

Cálculos para agregados moleculares. Cálculos en sólidos: el teorema de Bloch y condiciones de contorno periódicas. Bandas de energía electrónicas.

Lección 13: Interacciones moleculares

Ecuación de Schrödinger y fuerzas intermoleculares. Desarrollo multipolar. Campos de fuerza. Tipos de átomos. Energías de tensión, flexión y torsión de enlaces.

Tutoría 1: *Resumen de los elementos básicos de la Mecánica Cuántica.*

Tutoría 2: *Matemáticas para química computacional.*



Práctica 1:

Introducción a los distintos paquetes de cálculo de estructura electrónica. Elección de método de cálculo y elección de base. Definición de la geometría molecular y elección de coordenadas. Preparación de entradas a partir de datos experimentales (rayos X, microondas, etc.).

Práctica 2:

Análisis de resultados: Estudio de los orbitales moleculares y análisis de población.

Práctica 3:

Cálculo de espectros ro-vibracionales. Propiedades termodinámicas. Espectros electrónicos. Transiciones Franck-Condon.

Práctica 4:

Estudio de reacciones químicas de interés atmosférico. Mecanismos de reacción. Estudio de la reacción $O_3 + Cl$. Cálculo del estado de transición y del perfil de reacción. Análisis de la superficie de energía potencial. Cálculo de la constante cinética. Magnitudes termodinámicas de la reacción.

Práctica 5:

Agregados moleculares. Efectos de disolvente.

Práctica 6:

Cálculos mecanocuánticos de sólidos usando DFT: TiO_2 , hielos atmosféricos. Manejo del programa MS-Modelling.

TEMA II. Simulación molecular

Lección 14: Mecánica molecular

Campos de fuerza usados en líquidos y sistemas biológicos. Mecánica Molecular. Minimización de energía.

Lección 15: Termodinámica estadística y métodos de simulación

Estado del sistema y microestados. Factor de Boltzmann e integral de configuración. Función de partición. Principio ergódico. Muestreo del sistema.

Lección 16: Principios básicos de la simulación

Condiciones de contorno periódicas. Fuerzas de corto alcance. Truncamiento del potencial y lista de vecinos. Generación de la configuración inicial. Fase de equilibrado.

Lección 17: Fuerzas de largo alcance

Sumas de Ewald: suma y truncamiento en espacio real y espacio recíproco. Implementación PME.

Lección 18: Métodos de Monte Carlo I

Números aleatorios. Métodos de muestreo. Muestreo de importancia. Método de Metrópolis.

Lección 19: Métodos de Monte Carlo. II

Monte Carlo de moléculas rígidas. Simulaciones NVT. Simulaciones NpT



Lección 20: Métodos de Monte Carlo III

Monte Carlo de moléculas flexibles. Análisis conformacional. Simulación por MC de polímeros y biopolímeros.

Lección 21: Dinámica molecular I

Ecuaciones del movimiento para sistemas atómicos. Algoritmos de integración: Verlet y *leap-frog*. Paso de tiempo y conservación de la energía.

Lección 22: Dinámica molecular II

Termostatos: Berendsen, Nosé-Hoover y reescalado estocástico. Barostatos: Berendsen y Parrinello-Rahman. Ligaduras.

Lección 23: Cálculo de propiedades I

Cálculo de propiedades estáticas. Funciones de distribución. Presión. Fluctuaciones: capacidad calorífica, compresibilidad isoterma y constante dieléctrica.

Lección 24: Cálculo de propiedades II

Funciones de autocorrelación. Cálculo de propiedades dinámicas.

Lección 25: Cálculos de energías libres

Método de Widom. Integración termodinámica. Cristal de Einstein. Método perturbativo para energías libres (FEP). Integración Gibbs-Duhem. Equilibrio de fases.

Lección 26: Sistemas de interés biológico

El problema del plegamiento de proteínas. Reconocimiento molecular y diseño de fármacos: QSAR.

Tutoría 3: *Elementos básicos de Mecánica Estadística.*

Práctica 7:

Programas de modelización molecular. Visualización molecular.

Práctica 8:

Aspectos prácticos de la simulación molecular: elección de los parámetros de la simulación, condiciones (T, p o V constantes), paso de tiempo, dimensiones del sistema simulado, geometría de las condiciones periódicas.

Práctica 9:

Monte Carlo en moléculas rígidas y flexibles. Cálculos de propiedades termodinámicas, estructurales y funciones de correlación.

Práctica 10:

Dinámica Molecular. Termostatos y barostatos.

Práctica 10:

Dinámica Molecular. Análisis de trayectorias. Aplicaciones a líquidos y sólidos.

Prácticas 11 y 12:

Dinámica Molecular. Simulación de moléculas orgánicas y biopolímeros.



V.- COMPETENCIAS

■ GENERALES:

Las competencias generales del Módulo Avanzado de aplicación en esta asignatura son:

- **CG1-MA1:** Reconocer y valorar los procesos químicos en la vida diaria.
- **CG2-MA1:** Valorar la importancia de la Química y su impacto en la sociedad industrial y tecnológica.
- **CG2-MA2:** Relacionar áreas interdisciplinarias en plena expansión, y tomar conciencia de la importancia que la investigación interdisciplinar tiene en el avance de la Ciencia.
- **CG3-MA1:** Demostrar una base de conocimientos y habilidades con las que pueda continuar sus estudios en áreas especializadas de Química o en áreas multidisciplinares.
- **CG4-MA1:** Plasmar los conocimientos específicos de cada materia en el lenguaje científico universal, entendido y compartido interdisciplinariamente.
- **CG7-MA1:** Aplicar conocimientos teóricos y prácticos a la solución de problemas en Química y seleccionar el método más adecuado para resolverlos.
- **CG8-MA1:** Valorar investigaciones y estudios detallados en el campo de la Química.

■ ESPECÍFICAS:

Las competencias específicas de la Materia Química Física Avanzada que son de aplicación en esta asignatura son las siguientes:

- **CE11-MAQF1:** Obtener por simulación propiedades estructurales, termodinámicas y dinámicas de diferentes sistemas, tanto compuestos por moléculas aisladas como en fase condensada.
- **CE12-MAQF1:** Aplicar las técnicas actuales que se utilizan para la simulación en ordenador de sistemas moleculares.
- **CE12-MAQF2:** Manejar programas informáticos tanto comerciales como de acceso libre para la modelización y simulación de moléculas y sistemas químicos.

■ TRANSVERSALES:

Las competencias transversales del Módulo Avanzado que son de aplicación en esta asignatura son:

- **CT1-MA1:** Elaborar y escribir memorias e informes de carácter científico y técnico.
- **CT2-MA1:** Trabajar en equipo.
- **CT3-MA1:** Aprender a tomar decisiones ante un problema real práctico.



- **CT4-MA1:** Seleccionar el método más adecuado para resolver un problema planteado.
- **CT5-MA1:** Consultar, utilizar y analizar cualquier fuente bibliográfica.
- **CT5-MA2:** Manejar bibliografía y bases de datos especializadas, y de recursos accesibles a través de Internet.
- **CT7-MA1:** Usar programas informáticos que sirvan, en el mundo de la Química, para calcular, diseñar, simular, aproximar y predecir.
- **CT8-MA1:** Comunicarse en español utilizando los medios audiovisuales más habituales.
- **CT11-MA1:** Desarrollar trabajo autónomo.

VI. – HORAS DE TRABAJO Y DISTRIBUCIÓN POR ACTIVIDAD

Actividad	Presencial (horas)	Trabajo autónomo (horas)	Créditos
Clases teóricas	30	45	3,0
Seminarios	5	7,5	0,5
Tutorías / Trabajos dirigidos	3	4,5	0,3
Prácticas de laboratorio	24	18	1,68
Preparación de trabajos y exámenes	6	7	0,52
Total	68	82	6

VII.- METODOLOGÍA

Los contenidos de la asignatura se presentan a los alumnos en clases presenciales, divididas en dos tipos:

Las denominadas **clases presenciales de teoría** (3,0 créditos) se impartirán al grupo completo y en ellas se darán a conocer al alumno los contenidos fundamentales de la asignatura. Al comienzo de cada tema se expondrán claramente el programa y los objetivos principales del mismo. Al final del tema se hará un breve resumen de los conceptos más relevantes y se plantearán nuevos objetivos que permitirán interrelacionar contenidos ya estudiados con los del resto de la asignatura y con otras asignaturas afines. Durante la exposición de contenidos se propondrán problemas que ejemplifiquen los conceptos desarrollados o que sirvan de introducción a nuevos contenidos. Para facilitar la labor de seguimiento por parte del alumno de las clases presenciales se le proporcionará el material docente necesario, bien en fotocopia o en el Campus Virtual.

En las **clases presenciales de seminarios** (0,5 créditos) se resolverán ejercicios y cuestiones relacionados con los contenidos desarrollados en las clases de teoría. Periódicamente se suministrará al alumno una relación de dichos problemas/ejercicios con el objetivo de que intente su resolución previa a las clases, lo que incluirá en algunos casos



la consulta de bibliografía. En las clases presenciales de seminarios se seguirán diferentes metodologías: resolución completa de algunos de estos ejercicios y cuestiones seleccionados, discusión crítica de los resultados obtenidos por los alumnos. En cualquier caso se debatirá el procedimiento seguido, el resultado obtenido y su significado. Por último, algunos ejercicios serán recogidos por el profesor para su evaluación. Estas clases de teoría y seminario y el trabajo que conllevan desarrollan las competencias generales CG2-MA1, CG2-MA2, CG3-MA1, CG4-MA1, CG7-MA1 y CG8-MA1 y las transversales CT1-MA1, CT2-MA1, CT3-MA1, CT4-MA1, CT5-MA1 y CT7-MA1.

Durante el desarrollo del temario, tanto en las clases presenciales de teoría como en las de seminarios, el alumno adquirirá los conocimientos y la experiencia necesarios para satisfacer todas las competencias específicas a cubrir, CE11-MAQF1, CE12-MAQF1, CE12-MAQF2 y la transversal CT11-MA1. Además, durante el desarrollo de las sesiones se hará especial énfasis en relacionar los aspectos estudiados con otras disciplinas y fenómenos químicos en la vida diaria, así como en su carácter multidisciplinar, lo que satisfará las competencias generales CG1-MA1, CG2-MA1, CG3-MA1, y CG4-MA1, y las transversales CT8-MA1 y CT12-MA1.

Se realizarán **tutorías dirigidas** (0,3 créditos) tanto sobre temas directamente relacionados con los contenidos teóricos, para ampliar conocimientos y desarrollar habilidades, como sobre temas más transversales que permitan interrelacionar los contenidos de la asignatura con otros aspectos de interés. Como complemento al trabajo personal realizado por el alumno y para potenciar el desarrollo del trabajo en grupo, se propondrá la **elaboración y presentación de un trabajo**. Todo ello permitirá que el alumno ponga en práctica sus habilidades en la obtención de información, desarrollando habilidades relacionadas con la utilización crítica de información bibliográfica y bases de datos y el trabajo en equipo (CT1-MA1, CT5-MA1, CT5-MA2). Además, cada grupo de trabajo podrá evaluar, de forma anónima, el tema desarrollado por otro grupo, de manera análoga a la revisión entre pares propia de las publicaciones científicas, lo que desarrollará el sentido crítico y autocrítico. Este proceso deberá llevarse a cabo de manera previa a la exposición de cada uno de los grupos, de modo que los alumnos implicados introduzcan las correcciones pertinentes en la versión final del trabajo. El proceso de evaluación servirá para que los alumnos desarrollen capacidades de análisis crítico de trabajos científicos y sean capaces de corregir en sus propias elaboraciones los defectos que encuentren en los trabajos que evalúen.

El profesor programará **tutorías** con grupos reducidos de alumnos sobre cuestiones planteadas por el profesor o por los mismos alumnos. También estarán disponibles tutorías para alumnos que de manera individual deseen resolver las dudas que surjan durante el estudio. Estas tutorías se realizarán de forma presencial en los horarios indicados por cada profesor o, excepcionalmente, de modo virtual.

Se utilizará el Campus Virtual para permitir una comunicación fluida entre profesores y alumnos y como instrumento para poner a disposición de los alumnos el material que se utilizará en las clases tanto teóricas como de problemas. También podrá utilizarse como foro en el que se presenten algunos temas complementarios cuyo contenido, aunque importante en el conjunto de la materia, no se considere necesario presentarlo en las clases presenciales. Por último, esta herramienta permitirá realizar ejercicios de autoevaluación mediante pruebas objetivas de respuesta múltiple de corrección automática, que permiten mostrar tanto al profesor como al alumno qué conceptos necesitan de un mayor trabajo para su aprendizaje.



Se realizará un **laboratorio** (1,7 créditos) durante todo el curso con temáticas directamente relacionadas con los contenidos de la asignatura. Este laboratorio constará de prácticas de cálculo y de utilización de herramientas teóricas, y constituye una parte fundamental de esta asignatura. En las sesiones de laboratorio se desarrollarán las competencias específicas CE11-MAQF1, CE12-MAQF1, y CE12-MAQF2. En algunas prácticas se plantearán problemas que requieran las utilidades simultáneas de los conocimientos teóricos adquiridos y las herramientas de modelización y de cálculo disponibles en el laboratorio (o el aula de informática). Finalmente, el alumno presentará informes científicos individuales y en grupo de algunas de las prácticas realizadas (CT1-MA1, CT2-MA2, CT5-MA1, CT5-MA2, CT7-MA1, CT8-MA1).

VIII.- BIBLIOGRAFÍA

■ BÁSICA:

- Jensen, F., *“Introduction to Computational Chemistry”*, John Wiley & Sons, 2004.
- Frenkel, D. y Smit, B., *“Understanding molecular simulation: from algorithms to applications”*, 2ª Ed., Academic Press, 2002.

■ COMPLEMENTARIA:

- Leach, A.R., *“Molecular modelling: principles and applications”*, Prentice Hall, 2001.
- Bertrán Rusca J. y Núñez Delgado, J. (coord.), *“Química Física”*, Ariel Ciencia, 2002
- Engel, T. y Reid, P., *“Quantum Chemistry and Spectroscopy”*, Prentice Hall, 2006.
- Levine, I., *“Quantum Chemistry”*, 5ª Ed., Prentice Hall, 2000.
- Foresman, J.B. y Frisch, A., *“Exploring chemistry with electronic structure methods”*, 2ª Ed., Gaussian, 1996.
- Allen, M.P. y Tildesley, D.J., *“Computer simulation of liquids”*, Oxford Univ. Press, 1987.
- Rapaport, D.C., *“The art of molecular dynamics simulation”*, 2ª Ed., Cambridge University Press, 2004.
- van der Spoel, D. y otros, *“GROMACS user manual v4.0”*, www.gromacs.org

IX.- EVALUACIÓN

El rendimiento académico del alumno y la calificación final de la asignatura se computarán de forma ponderada atendiendo a los siguientes porcentajes, que se mantendrán en todas las convocatorias:

■ EXÁMENES ESCRITOS:

60%

Convocatoria de junio: se realizarán dos exámenes parciales y un examen final, comunes a todos los grupos. Los alumnos que superen los dos exámenes parciales no estarán obligados a presentarse al examen final, aunque la compensación entre



exámenes parciales requerirá una nota mínima de 4 sobre 10. En cualquier caso, la nota mínima en exámenes escritos para aprobar la asignatura es de 4 sobre 10. Los exámenes constarán de preguntas y problemas sobre los contenidos impartidos durante el curso, tanto en las clases teóricas y seminarios como tutorías dirigidas y laboratorios. En la convocatoria de septiembre se realizará un único examen final semejante al realizado en la convocatoria de junio.

Competencias evaluadas: CG1-MA1, CG2-MA1, CG2-MA1, CG2-MA2, CG3-MA1, CG4-MA1, CG7-MA1, CG8-MA1, CT1-MA1, CT2-MA1, CT3-MA1, CT4-MA1, CT5-MA1, CT7-MA1, CT8-MA1, CT12-MA1, CE11-MAQF2, CE11-MAQF3, CE12-MAQF2, CE13-MAQF1, CE13-MAQF2, CE13-MAQF3.

■ TRABAJO PERSONAL: 10%

La evaluación del trabajo de aprendizaje individual realizado por el alumno se llevará a cabo teniendo en cuenta los siguientes factores:

- Destreza del alumno en la resolución de los problemas y ejercicios propuestos, que se recogerán periódicamente en las clases presenciales.
- Valoración del trabajo realizado durante las tutorías en grupo programadas, de asistencia obligatoria, y a las cuales serán citados los alumnos periódicamente a lo largo del curso.
- Valoración de los trabajos propuestos en las tutorías programadas y realizados individualmente o en grupo por los alumnos.

La calificación obtenida por el alumno en junio por este concepto se mantendrá en la convocatoria de septiembre.

Competencias evaluadas: CG1-MA1, CG2-MA1, CG2-MA1, CG2-MA2, CG3-MA1, CG4-MA1, CG7-MA1, CG8-MA1, CT1-MA1, CT2-MA1, CT3-MA1, CT4-MA1, CT5-MA1, CT7-MA1, CT8-MA1, CT12-MA1, CE11-MAQF2, CE11-MAQF3, CE12-MAQF2, CE13-MAQF1, CE13-MAQF2, CE13-MAQF3.

■ LABORATORIO: 30%

Los alumnos desarrollarán en grupos reducidos a lo largo del curso una serie de prácticas de laboratorio, tanto de cálculo como de utilización de herramientas teóricas, siendo la asistencia a estas prácticas **obligatoria**. Se valorará la obtención por el alumno de habilidades teórico-prácticas y la destreza en el manejo de paquetes informáticos de tratamiento de datos y modelización molecular. Para algunas de las prácticas los alumnos deberán realizar un informe científico, individualmente o en grupo, que será objeto de evaluación. En cualquier caso, la nota mínima en el laboratorio para aprobar la asignatura es de 4 sobre 10.

La calificación obtenida por el alumno en junio por este concepto se mantendrá en la convocatoria de septiembre si el alumno ha obtenido una nota superior a la mínima. En caso contrario deberá realizar un examen de laboratorio en septiembre.

Competencias evaluadas: CE11-MAQF1, CE11-MAQF2, CE11-MAQF3, CE12-MAQF2, CE13-MAQF1, CE13-MAQF2, CE13-MAQF3, CT1-MA1, CT2-MA2, CT3-MA3, CT5-MA1, CT7-MA1.



■ ASISTENCIA Y PARTICIPACIÓN ACTIVA EN LAS CLASES:

La asistencia a todas las actividades presenciales es **obligatoria**, y la participación activa del alumno en todas las actividades docentes se valorará positivamente en la calificación final.



PLANIFICACIÓN DE ACTIVIDADES – CRONOGRAMA

TEMA	ACTIVIDAD	HORAS	GRUPOS	INICIO	FIN
I. Estructura electrónica	Clases Teoría	15	1	1ª Semana	8ª Semana
	Clases Problemas	2,5	1		
	Tutoría programada	2	1		
	Laboratorio	12	1		
II. Simulación molecular	Clases Teoría	15	1	8ª Semana	15ª Semana
	Clases Problemas	2,5	1		
	Tutoría programada	1	1		
	Laboratorio	12	1		



RESUMEN DE LAS ACTIVIDADES

Actividad docente	Competencias asociadas	Actividad Profesor	Actividad alumno	Procedimiento de evaluación	P	NP	Total	C
Clases de teoría	CG9-MF1, CG10-MF1, CG10-MF2, CG11-MF2, CG12-MF1, CG13-MF1, CT1-MF1, CT2-MF2, CT3-MF3, CT5-MF1, CT7-MF1, CE11-MFQF1, CE11-MFQF3, CE13-MFQF1, CE13-MFQF2	Exposición de conceptos teóricos y planteamiento de cuestiones y nuevos objetivos.	Toma de apuntes. Resolución de cuestiones. Desarrollo de los nuevos objetivos. Formulación de preguntas y dudas.	Calificación de las respuestas realizadas a preguntas relacionadas con los conceptos teóricos.	30	45	75	10%
Seminarios		Aplicación de la teoría a la resolución de ejercicios numéricos y problemas. Planteamiento de nuevas cuestiones.	Resolución de los ejercicios numéricos, problemas y cuestiones. Formulación de preguntas y dudas.	Calificación de las respuestas (planteamiento y resultado) realizadas para la resolución de ejercicios numéricos y problemas.	5	7,5	12,5	
Tutorías		Dirección y supervisión del estudio y actividades del alumno. Planteamiento de cuestiones. Resolución de dudas.	Consulta al profesor sobre las dificultades conceptuales y metodológicas que encuentra al estudiar la materia. Planteamiento de cuestiones y respuesta a las propuestas por el profesor.	No evaluable				
Tutorías dirigidas		Propuesta y valoración crítica de trabajos. Exposición y planteamiento de nuevos objetivos	Cooperación con los compañeros en la elaboración de trabajos. Análisis crítico de los trabajos de otros grupos. Presentación oral del trabajo corregido. Formulación de preguntas y dudas.	Valoración del trabajo, de los análisis realizados y de la presentación.	3	4,5	7,5	



Actividad docente	Competencias asociadas	Actividad Profesor	Actividad alumno	Procedimiento de evaluación	P	NP	Total	C
Laboratorio	CG9-MF1, CG10-MF1, CG10-MF2, CG11-MF2, CG12-MF1, CG13-MF1, CT1-MF1, CT2-MF2, CT3-MF3, CT5-MF1, CT7-MF1, CE11-MFQF1, CE11-MFQF3, CE13-MFQF1, CE13-MFQF2	Aplicación de los contenidos teóricos a problemas prácticos. Descripción de las herramientas de modelización molecular.	Preparación, realización y estudio de los contenidos propuestos. Elaboración de una memoria de las prácticas realizadas.	Valoración del trabajo realizado y de los resultados obtenidos. Valoración de la memoria de prácticas presentada. Valoración de las habilidades y conocimientos adquiridos.	24	18	42	30%
Exámenes		Propuesta, vigilancia y corrección del examen. Calificación del alumno.	Preparación y realización.	Corrección y valoración de los exámenes.	6	7	13	60%
P : Presenciales; NP: no presenciales (trabajo autónomo); C: calificación								