

**Proyecto/Guía docente de la asignatura**

Asignatura	SIMULACIONES COMPUTACIONALES EN QUÍMICA		
Materia	QUÍMICA AVANZADA		
Módulo			
Titulación	GRADO EN QUÍMICA		
Plan	2010	Código	45975
Periodo de impartición	Segundo cuatrimestre, 4º Curso	Tipo/Carácter	OP
Nivel/Ciclo	GRADO	Curso	4º
Créditos ECTS	6		
Lengua en que se imparte	ESPAÑOL		
Profesor/es responsable/s	Carmen Barrientos Benito y Víctor Manuel Rayón Rico		
Datos de contacto (E-mail, teléfono...)	carmen.barrientos@uva.es victormanuel.rayon@uva.es		
Departamento	Química Física y Química Inorgánica		



1. Situación / Sentido de la Asignatura

1.1 Contextualización

En el Plan de Estudios del Grado en Química, el alumno, tras cursar el bloque básico, comienza el bloque fundamental dedicado a materias más específicas de las diferentes áreas de la Química, entre las que se encuentra la Química Física, área a la que pertenece esta asignatura.

1.2 Relación con otras materias

La asignatura Química Física II emplea conocimientos adquiridos en la asignatura Química Física I cursada en el primer cuatrimestre del segundo curso. La asignatura, también está estrechamente relacionada con otra de segundo curso, la Química Experimental II, pues parte de ésta se dedica a llevar a la práctica, en laboratorio, los conocimientos teóricos de Química Física II.

1.3 Prerrequisitos

Se recomienda que el alumno conozca los conceptos básicos de Química Física



2. Competencias

G1, G2, G3, G4, G8, G9, EC1, EC2, EC3, EC5, EC7, EC8, EH1, EH2, EH4, EH5, EH6 (Según el punto 3.2 y 5.1 de la memoria de verificación del plan de estudios de Graduado en Química)

2.1

General

- G.1- Ser capaz de comunicarse con corrección tanto de forma oral como escrita.
- G.2- Ser capaz de resolver problemas tanto de naturaleza cualitativa como cuantitativa y de tomar decisiones.
- G.3- Ser capaz de encontrar y manejar información, tanto de fuentes primarias como secundarias.
- G.4- Ser capaz de trabajar de forma eficaz y autónoma mediante la planificación y la organización de su trabajo y de su tiempo.
- G.8- Poseer los hábitos, capacidad de aprendizaje y autonomía necesarios para proseguir su formación posterior.
- G.9- Conocer y apreciar las responsabilidades éticas y profesionales.

2.2 Específicas

- EC.1- Conocer y manejar los aspectos principales de terminología química.
- EC.2- Conocer la Tabla Periódica, su utilidad y las tendencias periódicas en las propiedades de los elementos.
- EC.3- Conocer los modelos y principios fundamentales de enlace entre los átomos, los principales tipos de compuestos a que esto da lugar y las consecuencias en la estructura y propiedades de los mismos.
- EC.5- Conocer los principales tipos de compuestos orgánicos e inorgánicos
- EC.7- Conocer los métodos fundamentales de análisis y caracterización estructural de compuestos químicos.
- EC.8- Reconocer aquellos aspectos dentro de la química que son interdisciplinarios o que suponen una frontera en el conocimiento.
- EH.1- Ser capaz de demostrar el conocimiento y comprensión de conceptos, principios y teorías esenciales en relación con la química.
- EH.2- Ser capaz de aplicar los conocimientos adquiridos a la resolución de problemas cualitativos y cuantitativos.
- EH.4- Ser capaz de analizar, interpretar y evaluar información química y datos químicos.
- EH.5- Ser capaz de comunicar información química y argumentar sobre ella.
- EH.6- Manejar las herramientas computacionales y de tecnología de la información básicas para el procesamiento de datos e información química.



3. Objetivos

- Conocer los principios de la Química Computacional y su aplicación al estudio de sistemas químicos.
- Conocer el fundamento de los métodos computacionales para el estudio de la estructura molecular. Poder predecir los espectros moleculares, valorando el grado de fiabilidad de dichas predicciones.
- Conocer las técnicas básicas de simulación (Dinámica Molecular; Monte Carlo) y sus aplicaciones en fases condensadas, macromoléculas y sistemas de interés biológico.
- Conocer los métodos computacionales para el estudio de las reacciones químicas y sus aplicaciones en campos de interés como la Química Atmosférica o la Química Interestelar.
- Reconocer la importancia científica de la Química Computacional y su impacto en la sociedad tecnológica actual. Comprender y utilizar la información bibliográfica y técnica referida a los procedimientos de la Química Computacional.





4. Contenidos y/o bloques temáticos

Bloque 1: Simulaciones Computacionales en Química

Carga de trabajo en créditos ECTS:

a. Contextualización y justificación

Las simulaciones computacionales constituyen una herramienta que cobra cada vez una mayor importancia en el campo de la Química. Se pretende proporcionar al alumno los elementos básicos para la utilización de estas herramientas en problemas químicos, independientemente de la orientación profesional que vaya a seguir en el futuro.

b. Objetivos de aprendizaje

Conocer los principios de la Química Computacional y su aplicación al estudio de sistemas químicos. Conocer el fundamento de los métodos computacionales para el estudio de la estructura molecular. Poder predecir los espectros moleculares, valorando el grado de fiabilidad de dichas predicciones. Aplicar los métodos computacionales para el estudio de las reacciones químicas y sus aplicaciones en diversos campos de interés

c. Contenidos

Tema 1. Introducción a la Química Computacional

Tema 2. Mecánica Molecular: análisis conformacional y sus aplicaciones en moléculas orgánicas y biológicas

Tema 3. Modelización de la estructura molecular: propiedades moleculares

Tema 4. Modelización de la estructura molecular: predicción de espectros moleculares

Tema 5. Modelización de las reacciones químicas.

d. Métodos docentes

Las clases presenciales se basarán en **clases expositivas** (lecciones magistrales o *lectures*) para la exposición y desarrollo de los fundamentos teóricos, y **clases prácticas**, más participativas, en las que se resolverán ejercicios y problemas. En todos los casos, se utilizarán aquellas T.I.C. que favorezcan la comprensión y participación de los alumnos. Las clases expositivas se reducirán todo lo posible, para poder disponer de más clases de índole práctica. **Se pretende desarrollar las clases en torno a problemas prácticos** que el alumno deberá abordar, para fomentar la adquisición de habilidades en el uso de las herramientas computacionales para estudiar problemas químicos de diversa índole.

En **las tutorías programadas** se tratarán de forma pormenorizada cuestiones o dudas relacionadas con la asignatura.

e. Plan de trabajo

Los alumnos participarán en sesiones de tutorías con el profesor responsable de las asignaturas. En ellas se trabaja sobre las dificultades concretas que plantea cada alumno. El trabajo autónomo, no presencial, de los alumnos viene a constituir un 60% de la carga de trabajo global



f. Evaluación

La evaluación de los alumnos se realizará mediante: a) Seguimiento continuo a través de controles periódicos o evaluación de problemas, trabajos u otras actividades; b) Examen final. En la calificación final tendrá mayor peso la nota obtenida en el examen final.

g. Bibliografía básica

- Química Cuántica. Fundamentos y aplicaciones computacionales ; Joan Bertrán Rusca y c.(Síntesis)
- Introduction to Computational Chemistry , Frank Jensen (Wiley)

h. Bibliografía complementaria

- Computational Chemistry, C.J. Cramer (Wiley)
- Computational Chemistry Workbook, T. Heine y col. (Wiley)
- Molecular Modelling for beginners, A. Hinchliffe (Wiley)
- Computational Chemistry, C.J. Cramer (Wiley)
- Computational Chemistry Workbook, T. Heine y col. (Wiley)
- Molecular Modelling for beginners, A. Hinchliffe (Wiley)

i. Recursos necesarios

La asignatura se realizará en aula de informática. Se utilizará equipo informático y de proyección audiovisual. Los alumnos dispondrán en la plataforma MOODLE de la UVa de toda la información básica requerida: Guía docente, contenidos-presentaciones, ejercicios prácticos, colección de problemas para para su uso en clase y trabajo personal.

Para consultas de los alumnos, el horario de tutorías será fijado por el profesor responsable.

j. Temporalización

CARGA ECTS	PERIODO PREVISTO DE DESARROLLO
TEMA 1- 1 ECTS	Inicio de Curso – 2ª semana Febrero (10 horas)
TEMA 2 – 1.5 ECTS	3ª semana Febrero – 2ª Semana Marzo (15 horas)
TEMA 3- 1.5 ECTS	3ª semana Marzo– 2ª Semana Abril (15 horas)
TEMA 4 – 1 ECTS	4ª semana Abril – 2ª Semana Mayo (10 horas)
TEMA 5- 1 ECTS	3ª semana Mayo– 4ª Semana Mayo (10 horas)

Añada tantas páginas como bloques temáticos considere realizar.



5. Métodos docentes y principios metodológicos

Para la enseñanza de los fundamentos teóricos de la asignatura se utilizarán sesiones presenciales que se basarán en clases expositivas (lecciones magistrales o *lectures*): Para las clases prácticas de laboratorio computacional se realizarán sesiones más participativas, en las que se resolverán distintas problemáticas químicas. Se utilizarán en ambos casos aquellas T.I.C. que favorezcan la comprensión y participación de los alumnos.

En las tutorías programadas se tratarán de forma pormenorizada bien sea individualmente o en pequeños grupos cuestiones o dudas relacionadas con la asignatura.

Toda la información que se requiere para el desarrollo de la asignatura se encuentra recogida en la plataforma MOODLE de la UVa (<http://campusvirtual.uva.es/>): Guía docente, contenidos-presentaciones, materiales adicionales (links de interés, hojas de cálculo, ficheros, publicaciones científicas, etc. La plataforma MOODLE se utiliza, además para entregar las tareas en formato electrónico, así como para el intercambio de opiniones, resolución de dudas, etc. Los alumnos accederán a la misma utilizando las cuentas y claves que, de forma automática, les proporciona la Universidad de Valladolid



**6. Tabla de dedicación del estudiante a la asignatura**

ACTIVIDADES PRESENCIALES	HORAS	ACTIVIDADES NO PRESENCIALES	HORAS
Clases teóricas	6	Estudio y trabajo autónomo individual	80
Clases prácticas		Estudio y trabajo autónomo grupal	10
Laboratorios	50		
Prácticas externas, clínicas o de campo			
Seminarios	4		
Otras actividades			
Total presencial	60	Total no presencial	90

7. Sistema y características de la evaluación

INSTRUMENTO/PROCEDIMIENTO	PESO EN LA NOTA FINAL	OBSERVACIONES
Tareas: Resolución de problemas y ejercicios prácticos, tutorías.	30%	
Examen final en las fechas y convocatorias fijadas por la Facultad de Ciencias	70%	

CRITERIOS DE CALIFICACIÓN**• Convocatoria ordinaria:**

Se aplicará cualquiera de las dos fórmulas que dé lugar al mayor resultado

[0.3 (Tareas) +0.7 (Examen Final)] o [Examen final 1ª Convocatoria]

• Convocatoria extraordinaria:

La calificación corresponderá al examen de la convocatoria extraordinaria.

8. Consideraciones finales