

**Proyecto/Guía docente de la asignatura**

Asignatura	Química Computacional de Compuestos Bio-Orgánicos		
Materia	Materia Obligatoria Avanzada		
Módulo			
Titulación	Máster en Técnicas Avanzadas en Química. Análisis y Control de Calidad Químicos		
Plan		Código	
Periodo de impartición	2º Cuatrimestre	Tipo/Carácter	Obligatoria
Nivel/Ciclo	Posgrado	Curso	Primero
Créditos ECTS	3		
Lengua en que se imparte	Español		
Profesor/es responsable/s	Carmen Barrientos Benito, Pilar Redondo Cristóbal		
Datos de contacto (E-mail, teléfono...)	Carmen.barrientos@uva.es ; predondo@qf.uva.es		
Departamento	Química Física y Química Inorgánica		



1. Situación / Sentido de la Asignatura

1.1 Contextualización

La asignatura de Química Computacional de Compuestos Bio-Orgánicos proporciona al alumno un conjunto de conocimientos avanzados en Química-Física que le permitirán completar la formación básica obtenida en el Grado. Asimismo, ayudará a fundamentar su trabajo Fin de Máster. Esta asignatura presenta métodos teóricos avanzados, para la investigación de la estructura, propiedades y reactividad de los sistemas químicos. Más concretamente, se aplicarán técnicas avanzadas de la Química Computacional al estudio de la estructura molecular y la reactividad química, así como técnicas de simulación modernas de aplicación en fases condensadas y sistemas de interés biológico.

1.2 Relación con otras materias

Los conocimientos adquiridos a través de las técnicas computacionales aplicadas a compuestos bio-orgánicos que se presentan en esta asignatura están en la base de cualquier estudio de la reactividad química o de la estructura molecular. Por consiguiente, esta asignatura está íntimamente relacionada con el resto de materias impartidas en este máster.

1.3 Prerrequisitos

Como recomendación general, se requiere que el alumno conozca los conceptos básicos de Química-Física



2. Competencias

2.1 Generales

G1.- Conocimiento del método científico.

Conocer el método científico dentro de las ciencias experimentales, en particular en el ámbito de la Química, formulando modelos e hipótesis de trabajo relevantes y planificando el análisis en relación con dichas hipótesis y la discusión de las conclusiones, de modo que se pueda avanzar en el conocimiento científico.

G2.- Competencia para aplicar los conocimientos adquiridos.

Es la capacidad para aplicar los conocimientos técnicos adquiridos, de forma coherente y profesional, sobre todo en contextos novedosos o en constante renovación, que impliquen la realización de una actividad química

G3.- Capacidad crítica, de análisis y síntesis, y capacidad de interpretación.

Ser capaz de emitir juicios críticos sobre propuestas, hipótesis y validez científica de las conclusiones, así como sintetizar propuestas y resultados dentro del ámbito de la química.

G4.- Competencias metodológicas.

Es la capacidad para elegir la metodología más adecuada para el desarrollo de la investigación y resolución de un problema concreto, adaptándola al contexto en el que se éste se ha originado.

G5.- Capacidad para valorar la originalidad y creatividad.

Es la competencia para reconocer la originalidad en la concepción, formulación y resolución de problemas, en el ámbito de la investigación química y científico-tecnológica en general.

G6.- Capacidades de comunicación.

Ser capaz de presentar de forma oral y escrita, ante públicos especializados o no, resultados avanzados de investigación química, considerando antecedentes, hipótesis de trabajo, resultados y conclusiones

G7.- Capacidad de trabajo en equipo.

Capacidad para el desarrollo de actividades químicas, supervisadas o autónomas, al servicio de un proyecto de trabajo común, que puede ser multidisciplinar.

G8.- Capacidad para el uso de las nuevas tecnologías.

Adquirir destrezas generales en el uso de las nuevas tecnologías en el ámbito de la química, que le permiten la utilización de las herramientas informáticas disponibles más importantes en el campo científico-tecnológico.

G9.- Desarrollar el interés por la formación permanente.

Promover un interés permanente para ampliar conocimientos y el desarrollo de un perfil profesional específico, mediante el estudio, la reflexión y la investigación.

G10.- Capacidad de aprendizaje autónomo.



Adquirir las destrezas necesarias para el aprendizaje autónomo en el ámbito de la Química, reconociendo las fuentes de conocimiento para dicho aprendizaje y su utilización, y motivando el aprendizaje a lo largo de la vida, en el ámbito de la química.

2.2 Específicas

E1.- Adquisición de destrezas técnicas generales en el ámbito de una o varias disciplinas químicas.

Comprende esta competencia la capacidad de utilización de forma profesional del lenguaje y de las técnicas avanzadas propias de algunas de las especialidades de la Química, para favorecer la interpretación fluida de las fuentes especializadas de dichas disciplinas y la formulación adecuada de nuevos problemas.

E2.- Adquisición de destrezas técnicas generales para el estudio y resolución de problemas analíticos.

Comprende esta competencia la capacidad de elección y utilización de forma profesional de las técnicas avanzadas propias de algunas de las especialidades de la Química, para favorecer el estudio y en su caso resolución de problemas analíticos.

E3.- Capacidad para iniciarse en la investigación en Química.

El alumno del Máster adquirirá competencias suficientes que le permitan iniciar un proyecto de investigación en alguna de las áreas de conocimiento de la Química, de forma que pueda integrarse en las líneas de investigación de un Programa de Doctorado de la Universidad de Valladolid., o en un departamento de I+D+i de una empresa pública o privada

E4.- Capacidad y destrezas para la gestión de las fuentes de la investigación en Química.

Comprende esta competencia la capacidad del estudiante para la búsqueda y gestión de documentación y bibliografía especializada química, el uso racional y crítico de ésta para determinar el estado del arte en un determinado problema, y el dominio de los recursos bibliográficos pertinentes.

E5.- Capacidad de aplicar y adaptar los modelos teóricos y las técnicas específicas tanto a problemas abiertos en su línea de especialización, como a problemas provenientes de otros ámbitos ya sean científicos o técnicos.

Competencia para adaptar los modelos teóricos químicos para el estudio de problemas relacionados con la química o provenientes de otros campos científico-tecnológicos.

E7.- Capacidad de defender trabajos de investigación avanzados en el ámbito de sus líneas de especialización, así como de mantener debates científicos sobre los mismos, ya sean estos propios o adquiridos.

Capacidad estrechamente vinculada a la competencia de una buena comunicación científica, en el ámbito propio de la especialización adquirida, tanto para defender las tesis propias como para debatir con juicio crítico con terceros, en una relación entre pares.

E9.- Capacidad de detectar líneas de trabajo e investigación emergentes en el ámbito de la química o de sus aplicaciones.

Competencia para reconocer líneas de investigación emergentes en el ámbito de las Matemáticas o de sus aplicaciones, identificando las interrelaciones existentes con cada una de las especialidades.



E11.-Capacidad de relacionar las características espectroscópicas con la estructura molecular.

Esta competencia implica ser capaz de relacionar las características espectroscópicas experimentales, con la estructura molecular de los diferentes compuestos, así como la de predecir, a partir de esta última, las posibles características espectroscópicas que pueden ser esperadas.

E15.- Capacidad de conocer, elegir y aplicar nuevas técnicas instrumentales para la resolución de problemas químicos o analíticos

Esta competencia implica el conocimiento de técnicas instrumentales avanzadas, que permita la elección de la más adecuada para la resolución de un problema químico o analítico concreto.





3. Objetivos

1. Conocer las técnicas avanzadas de la Química Computacional y su aplicación al estudio de sistemas orgánicas y de interés farmacológico
2. Conocer las técnicas computacionales para el estudio de la estructura molecular.
3. Conocer las técnicas de simulación actuales de aplicación en fases condensadas.
4. Conocer las técnicas computacionales para relacionar cuantitativamente la estructura molecular y las propiedades físico-químicas de los sistemas bio-orgánicos





4. Contenidos y/o bloques temáticos

Bloque 1: “Química Computacional de Compuestos Bio-Orgánicos”

Carga de trabajo en créditos ECTS: 3.0

a. Contextualización y justificación

La asignatura se ha estructurado en un bloque único.

b. Objetivos de aprendizaje

1. Conocer las técnicas avanzadas de la Química Computacional y su aplicación al estudio de sistemas orgánicas y de interés farmacológico
2. Conocer las técnicas computacionales para el estudio de la estructura molecular.
3. Conocer las técnicas de simulación actuales de aplicación en fases condensadas.
4. Conocer las técnicas computacionales para relacionar cuantitativamente la estructura molecular y las propiedades físico-químicas de los sistemas bio-orgánicos

c. Contenidos

- **Técnicas modernas en Química Computacional.** En este primer apartado se presentarán de forma somera los principios teóricos y una introducción a las metodologías más utilizadas.
- **Estudios computacionales de la estructura molecular.** Mediante casos prácticos pretendemos que el alumno pueda llevar a cabo estudios sencillos aplicados al análisis de la estructura molecular.
- **Técnicas computacionales en Cinética Química.** De particular importancia en la Química son los estudios cinéticos. En este apartado presentamos de forma resumida las técnicas y modelos más utilizados.
- **Técnicas de simulación.** Finalmente, discutiremos brevemente las técnicas modernas de simulación de fases condensadas y de otros sistemas de interés como los sistemas biológicos. De nuevo, el cuerpo de este apartado serán los casos prácticos a través de los cuales los alumnos puedan ir adquiriendo los conocimientos y destrezas requeridas.

d. Métodos docentes

La asignatura se centrará en el desarrollo de casos prácticos por parte del alumno. Para ello, disponemos de ordenadores con el software computacional necesario instalado, así como un centro de cálculo en el que puedan desarrollar las simulaciones más avanzadas.

La plataforma MOODLE se utilizará 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.



e. Plan de trabajo

Actividades en las sesiones dedicadas a Teoría (PRESENCIALES).

- Clase magistral con exposición de fundamentos teóricos por parte del profesor

Actividades dedicadas a la resolución de casos prácticos por parte del alumno (PRESENCIALES).

- Clases realizadas en el aula de informática

Actividades fuera del aula (NO PRESENCIALES)

- Preparación, ampliación y estudio del material
- Resolución de ejercicios y preparación de memorias

Tutorías

f. Evaluación

La evaluación consta de una parte de evaluación continua donde los alumnos van entregando las soluciones a los problemas prácticos que se les plantean en el desarrollo de la asignatura y otra parte que consiste en un examen final.

g. Bibliografía básica

- Andrés, J. y Bertrán, J. (Ed.), *Theoretical and Computational Chemistry: Foundations, Methods and Techniques*, Universitat Jaume I, Castellón, 2007.
- Cramer, C.J., *Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models* (2nd Ed), Wiley, New York, 2004.
- Heine, T., Joswig, J-O., Gelessus, A., *Computational Chemistry Workbook*, Wiley-VCH, New York, 2009.
- Hinchliffe, A., *Molecular Modelling for Beginners* (2nd Ed.), Wiley, New York, 2008.
- Jensen, F., *Introduction to Computational Chemistry* (3rd Ed.), Wiley, New York, 2017.

h. Bibliografía complementaria

- Bertrán Rusca, J. y co-autores, "Química Cuántica: Fundamentos y Aplicaciones Computacionales), Síntesis (2000).
- Levine, I. N. *Quantum Chemistry*, Prentice-Hall, New Jersey, 2001. (Versión castellana: Pearson Educación, Madrid, 2001).
- McQuarrie, D.A. "Quantum Chemistry", Oxford University Press, Oxford, 1983.
- Pilar, F. L. "Elementary Quantum Chemistry", McGraw-Hill, New York, 1990.
- Lowe, J.P. "Quantum Chemistry", Academic Press, New York, 1993.



i. Recursos necesarios

La Facultad de Ciencias dispone de aulas con los recursos necesarios para desarrollar las clases teóricas, así como aulas de informática con el software necesario para realizar los casos prácticos.

j. Temporalización

CARGA ECTS	PERIODO PREVISTO DE DESARROLLO
3.0	Durante el segundo cuatrimestre

5. Métodos docentes y principios metodológicos

La asignatura se centrará en el desarrollo de casos prácticos por parte del alumno. Para ello, disponemos de ordenadores con el software computacional necesario instalado que permite desarrollar las actividades prácticas que se van proponiendo al alumno.

La plataforma MOODLE se utilizará 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	15	Estudio y trabajo autónomo individual	35
Clases prácticas	10	Estudio y trabajo autónomo grupal	10
Laboratorios			
Prácticas externas, clínicas o de campo			
Seminarios			
Otras actividades	5		
Total presencial	30	Total no presencial	45

7. Sistema y características de la evaluación

INSTRUMENTO/PROCEDIMIENTO	PESO EN LA NOTA FINAL	OBSERVACIONES
Evaluación continua	70	
Examen Final	30	

CRITERIOS DE CALIFICACIÓN

- **Convocatoria ordinaria:**
 - Evaluación continua (70%)
 - Examen final (30%)
- **Convocatoria extraordinaria:**
 - Examen Final (100%)

8. Consideraciones finales