

**Proyecto/Guía docente de la asignatura**

Se debe indicar de forma fiel cómo va a ser desarrollada la docencia. Esta guía debe ser elaborada teniendo en cuenta a todos los profesores de la asignatura. Conocidos los espacios y profesorado disponible, se debe buscar la máxima presencialidad posible del estudiante siempre respetando las capacidades de los espacios asignados por el centro y justificando cualquier adaptación que se realice respecto a la memoria de verificación. Si la docencia de alguna asignatura fuese en parte online, deben respetarse los horarios tanto de clase como de tutorías. La planificación académica podrá sufrir modificaciones de acuerdo con la actualización de las condiciones sanitarias.

<b>Asignatura</b>	SIMULACIONES COMPUTACIONALES EN QUÍMICA		
<b>Materia</b>	QUÍMICA AVANZADA		
<b>Módulo</b>			
<b>Titulación</b>	QUÍMICA AVANZADA		
<b>Plan</b>	611	<b>Código</b>	45975
<b>Periodo de impartición</b>	Segundo cuatrimestre, 4º Curso	<b>Tipo/Carácter</b>	OP
<b>Nivel/Ciclo</b>	GRADO	<b>Curso</b>	4º
<b>Créditos ECTS</b>	6		
<b>Lengua en que se imparte</b>	ESPAÑOL		
<b>Profesor/es responsable/s</b>	Carmen Barrientos Benito Víctor Manuel Rayón Rico		
<b>Datos de contacto (E-mail, teléfono...)</b>	<a href="mailto:carmen.barrientos@uva.es">carmen.barrientos@uva.es</a> <a href="mailto:victormanuel.rayon@uva.es">victormanuel.rayon@uva.es</a>		
<b>Departamento</b>	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 Generales

---

- 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

La asignatura se ha estructurado en un bloque único.

##### Bloque 1: Simulaciones Computacionales en Química

Carga de trabajo en créditos ECTS: 6

###### 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. Métodos de la Química Teórica. Mecánica Molecular.
- Tema 2. Modelización de la estructura molecular: propiedades moleculares
- Tema 3. Modelización de la estructura molecular: predicción de espectros moleculares
- Tema 4. Modelización de las reacciones químicas.

###### d. Métodos docentes

Las clases presenciales se basarán en clases expositivas (lecciones magistrales o *lectures*) el 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.

###### e. Plan de trabajo

Los alumnos realizarán las prácticas propuestas tutorizados por el profesor responsable de la asignatura. En todas las sesiones 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 seguimiento continuo a través de presentación de informes de las prácticas y fichas de resultados

## g. Material docente

*Esta sección será utilizada por la Biblioteca para etiquetar la bibliografía recomendada de la asignatura (curso) en la plataforma Leganto, integrada en el catálogo Almena y a la que tendrán acceso todos los profesores y estudiantes. Es fundamental que las referencias suministradas este curso estén actualizadas y sean completas. Los profesores tendrán acceso, en breve, a la plataforma Leganto para actualizar su bibliografía recomendada ("Listas de Lecturas") de forma que en futuras guías solamente tendrán que poner el enlace permanente a Leganto, el cual también se puede poner en el Campus Virtual.*

### g.1 Bibliografía básica

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

### g.2 Bibliografía complementaria

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

### g.3 Otros recursos telemáticos (píldoras de conocimiento, blogs, videos, revistas digitales, cursos masivos (MOOC), ...)

## h. Recursos necesarios

La asignatura se realizará en aula de informática y en caso de un posible confinamiento por un rebrote de la enfermedad por mandato de las autoridades los alumnos podrán realizar las prácticas mediante un ordenador personal. 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 prácticas para para su uso en clase y trabajo personal.

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

## i. Temporalización

CARGA ECTS	PERIODO PREVISTO DE DESARROLLO
Tema 1 (1.5 ECTS)	15 Febrero -10 Marzo
Tema 2 (1.5 ECTS)	11 Marzo – 5 Abril
Tema 3 (1.5 ECTS)	6 Abril – 3 Mayo
Tema 4 (1.5 ECTS)	4 Mayo – 25 Mayo



## 5. Métodos docentes y principios metodológicos

Si el número de alumnos matriculados se pueden encajar en las aulas de informática disponibles manteniendo los protocolos de seguridad establecidos se llevará a cabo docencia presencial. Si el número de alumnos no encajan en las aulas disponibles manteniendo los protocolos de seguridad establecidos se llevará a cabo docencia semipresencial (bimodal), realizándose las clases a través de videoconferencia utilizando Cisco Web

- Se utilizará la plataforma Moodle para incluir las presentaciones de los temas de la asignatura, así como los documentos detallados con las explicaciones correspondientes.
- Para cada una de las prácticas se incluirá en Moodle un documento explicativo que permita guiar la realización de las prácticas.
- Se habilitarán en Moodle foros de dudas, para cada una de las prácticas, para que los alumnos canalicen sus preguntas.
- Se activarán tareas de entrega semanales correspondientes a cada una de las prácticas propuestas.



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

ACTIVIDADES PRESENCIALES o PRESENCIALES A DISTANCIA <sup>(1)</sup>	HORAS	ACTIVIDADES NO PRESENCIALES	HORAS
Clases teóricas	15	Preparación y estudio personal de los contenidos teóricos	10
Clases prácticas. Laboratorios	45	Preparación de Menorías de prácticas	40
		Preparación de Fichas de Resultados	40
Total presencial	<b>60</b>	Total no presencial	<b>90</b>
TOTAL presencial + no presencial			<b>150</b>

(1) Actividad presencial a distancia es cuando un grupo sigue una videoconferencia de forma síncrona a la clase impartida por el profesor para otro grupo presente en el aula.

## 7. Sistema y características de la evaluación

Criterio: cuando al menos el 50% de los días lectivos del cuatrimestre transcurran en normalidad, se asumirán como criterios de evaluación los indicados en la guía docente. Se recomienda la evaluación continua ya que implica minimizar los cambios en la adenda.

INSTRUMENTO/PROCEDIMIENTO	PESO EN LA NOTA FINAL	OBSERVACIONES
Seguimiento continuo: Entrega de Informes de Prácticas	50%	
Seguimiento continuo: Entrega de Fichas de Resultados	50%	

### CRITERIOS DE CALIFICACIÓN

- **Convocatoria ordinaria:**  
Los alumnos deberán entregar informes de tres de las prácticas realizadas (50%) y entregar fichas de resultados del resto de las prácticas (50%)
- **Convocatoria extraordinaria:**  
Los alumnos deberán entregar informes de tres de las prácticas realizadas (50%) y entregar fichas de resultados del resto de las prácticas (50%)

## 8. Consideraciones finales

*La utilización y difusión de materiales docentes sin la autorización expresa de su autor es un uso prohibido que atenta contra el derecho a la propiedad intelectual y puede constituir un ilícito civil o incluso penal, generando responsabilidades legales a la persona infractora.*