GUÍA DOCENTE

DENOMINACIÓN DE LA ASIGNATURA

Denominación: **QUÍMICA COMPUTACIONAL APLICADA**
Código: 100477
Plan de estudios: **GRADO DE QUÍMICA** Curso: 4
Denominación del módulo al que pertenece: APLICADO
Materia: QUÍMICA (OPTATIVA 3)
Carácter: OPTATIVA
Duración: SEGUNDO CUATRIMESTRE
Créditos ECTS: 3.0
Horas de trabajo presencial: 30
Porcentaje de presencialidad: 40.0%
Horas de trabajo no presencial: 45
Plataforma virtual: http://www3.uco.es/amoodle

DATOS DEL PROFESORADO

Nombre: CAMACHO DELGADO, LUIS (Coordinador)
Departamento: QUÍMICA FÍSICA Y TERMODINÁMICA APLICADA
Área: QUÍMICA FÍSICA
Ubicación del despacho: Campus de Rabanales- Edificio C3-2ªPlanta
E-Mail: qf1cadel@uco.es Teléfono: 957218617

REQUISITOS Y RECOMENDACIONES

Requisitos previos establecidos en el plan de estudios

El estudiante podrá matricularse de asignaturas optativas una vez que haya superado los 60 créditos de formación básica, y al menos otros 30 créditos Obligatorios

Recomendaciones

Es conveniente haber adquirido conocimientos suficientes en las materias de Matemáticas generales y Química Cuántica

COMPETENCIAS

CB3	Comunicación oral y escrita en la lengua nativa.
CB5	Capacidad para la gestión de datos y la generación de información / conocimiento.
CB10	Capacidad de aprendizaje autónomo para el desarrollo continuo profesional.
CE6	Principios de mecánica cuántica y su aplicación en la descripción de la estructura y propiedades de átomos y moléculas.
CE21	Capacidad para demostrar el conocimiento y comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química.
CE22	Capacidad de aplicar dichos conocimientos a la resolución de problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados.
CE26	Destreza en el manejo y procesado informático de datos e información química.
CE31	Interpretación de datos procedentes de observaciones y medidas en el laboratorio en términos de su significación y de las teorías que la sustentan.
CU2	Conocer y perfeccionar el nivel de usuario en el ámbito de las TIC.

GUÍA DOCENTE

OBJETIVOS

Conocer los principios de la Química Computacional y de los diferéntes métodos de cálculo y sus aplicaciones en la predicción de propiedades fisico-químicas moleculares, así como en el diseño de compuestos con propiedades predeterminadas

CONTENIDOS

1. Contenidos teóricos

Lección 1. Principios Básicos de la Química Computacional. Nociones generales. Modelos moleculares y visualización de moléculas. Sistemas de coordenadas y formatos. Superficie de energía potencial. Ángulo diedro: conformación y configuración. Mecánica Molecular (MM). Campos de fuerza.

Lección 2. Mecánica Cuántica. La ecuación de Schrödinger. El Hamiltoniano molecular. Aproximación de Born-Oppenheimer. Métodos "Ab Initio": El método de Hartree-Fock o del campo autoconsistente. Métodos semi-empíricos. Teoría del funcional de la densidad. Comparación de distintos métodos. Métodos híbridos.

Lección 3. Técnicas de Simulación. Optimización de la geometría. Dinámica Molecular (DM). Simulaciones Monte Carlo y Dinámica de Langevin.

Lección 4. Aplicaciones. Establecimiento de relaciones estructura molecular- propiedades fisico-químicas. Relaciones cuantitativas estructura-actividad (QSAR). Diseño de compuestos dirigido por QSAR.

2. Contenidos prácticos

Cálculos mediante mecánica molecular. Cálculos semi-empíricos. Cálculos ab initio. Cálculos de optimización geométrica. Cálculos mediante dinámica molecular. Relaciones cuantitativas estructura-actividad. Determinación de parámetros QSAR

METODOLOGÍA

Aclaraciones generales sobre la metodología (opcional)

Los seminarios tendrán lugar en aulas de informática. La asistencia tanto a las lecciones magistrales como seminarios es obligatoria.

Adaptaciones metodológicas para alumnado a tiempo parcial y estudiantes con discapacidad y necesidades educativas especiales

Las adaptacionesde la metodología didáctica para los estudiantes a tiempo parcial, estudiantes con discapacidad y necesidades educativas especiales, se especificarán una vez conocida la causistica de este colectivo.

Actividades presenciales

Actividad	Grupo completo	Grupo mediano	Total
Actividades de evaluación	3	-	3
Lección magistral	14	-	14
Seminario	-	13	13
Total horas:	***17***	***13***	***30***

GUÍA DOCENTE

Actividades no presenciales

Actividad	Total
Ejercicios	10
Estudio	35
Total horas:	***45***

MATERIAL DE TRABAJO PARA EL ALUMNO

Dossier de documentación
Ejercicios y problemas
Manual de la asignatura

EVALUACIÓN

Competencias	Pruebas de ejecución de tareas reales y/o simuladas	Resolución de problemas	Supuesto práctico/discusión caso clínico/discusión trabajo científico
CB10	X	X	X
CB3	X	X	
CB5	X	X	X
CE21		X	X
CE22	X		X
CE26		X	X
CE31		X	X
CE6	X	X	X
CU2	X	X	X
Total (100%)	***30%***	***40%***	***30%***
Nota mínima (*)	***4***	***4***	***4***

(*)Nota mínima para aprobar la asignatura

GUÍA DOCENTE

Método de valoración de la asistencia:

La asistencia es obligatoria

Aclaraciones generales sobre los instrumentos de evaluación:

El software adecuado para los diferentes cálculos será proporcinado por el profesor

Aclaraciones sobre la evaluación para el alumnado a tiempo parcial y necesidades educativas especiales:

El trabajo práctico final representa el 60% de la nota final. Durante los seminarios los alumnos deberan resolver diferentes problemas prácticos, lo que representa el 20% de la nota, asimismo deberan constestar a ciertas tareas planteadas, lo que representa otro 20% de la nota final.

Las adaptaciones de la evaluación para los estudiantes a tiempo parcial y necesidades educativas especiales se especificarán una vez conocida la causistica de este colectivo.

Criterios de calificación para la obtención de Matrícula de Honor:

Nota media igual o superior a 9. El número de MH dependerá del número de alumnos matriculados, de acuerdo con la normativa de la UCO

BIBLIOGRAFIA

1. Bibliografía básica

Computational Chemistry. E. G. Lewars. Ed: Springer. 2011, 2ª ed.
Computational Medical Chemistry for Drug Discovery. P. Bultink (Ed.) Ed: Marcel Dekker. 2004
Theoretical and Computational Chemsitry. Juan Andrés y Juan Beltran. Editorial: Universitat Jaume I. 2000
Physical Chemistry. Atkins y de Paula. Ed. Panamericana, 2008. 8ª Edición
Physical Chemistry. Thomas Engel y Philip Reid. Ed. Pearson Addison Wesley. 2006.
Physical Chemistry. J. Bertrán, J. Núñez, Ed. Ariel Ciencia, 2002

2. Bibliografía complementaria

Ninguna

CRITERIOS DE COORDINACIÓN

Fecha de entrega de trabajos
Realización de actividades

CRONOGRAMA

Periodo	Actividades de evaluación	Lección magistral	Seminario
1ª Quincena	0,0	4,0	0,0
2ª Quincena	0,0	4,0	4,0

GUÍA DOCENTE

Periodo	Actividades de evaluación	Lección magistral	Seminario
3ª Quincena	0,0	4,0	6,0
4ª Quincena	0,0	2,0	3,0
7ª Quincena	3,0	0,0	0,0
Total horas:	***3,0***	***14,0***	***13,0***

Las estrategias metodológicas y el sistema de evaluación contempladas en esta Guía Docente serán adaptadas de acuerdo a las necesidades presentadas por estudiantes con discapacidad y necesidades educativas especiales en los casos que se requieran.

PLAN DE CONTINGENCIA: ESCENARIO A

El escenario A, se corresponde con una menor actividad académica presencial en el aula como consecuencia de medidas sanitarias de distanciamiento interpersonal que limite el aforo permitido en las aulas.

METODOLOGÍA

Aclaraciones generales sobre la metodología en el escenario A

Se adoptará un sistema multimodal o híbrido de enseñanza que combine, en todo lo posible, las clases presenciales en aula y las clases presenciales por videoconferencia (sesiones síncronas) que se impartirán en el horario aprobado por el Centro. La distribución temporal de las actividades que se llevarán a cabo de forma presencial en aula y presencial por videoconferencia estará determinado por el Centro en función del aforo permitido en los espacios docentes y las medidas sanitarias de distanciamiento interpersonal que estén vigentes en cada momento.

Los seminarios tendrán lugar en aulas de informática. La asistencia tanto a las lecciones magistrales como seminarios es obligatoria.

GUÍA DOCENTE

EVALUACIÓN

Competencias	Pruebas de ejecución de tareas reales y/o simuladas	Resolución de problemas	Supuesto práctico/discusión caso clínico/discusión trabajo científico
CB10	X	X	X
CB3	X	X	
CB5	X	X	X
CE21		X	X
CE22	X		X
CE26		X	X
CE31		X	X
CE6	X	X	X
CU2	X	X	X
Total (100%)	***30%***	***40%***	***30%***
Nota mínima (*)	***4***	***4***	***4***

(*)Nota mínima para aprobar la asignatura

Método de valoración de la asistencia (Escenario A):

La asistencia es obligatoria

Aclaraciones generales sobre los instrumentos de evaluación (Escenario A):

El software adecuado para los diferentes cálculos será proporcinado por el profesor.

El trabajo práctico final representa el 60% de la nota final. Durante los seminarios los alumnos deberan resolver diferentes problemas prácticos, lo que representa el 20% de la nota, asimismo deberan constestar a ciertas tareas planteadas, lo que representa otro 20% de la nota final.

En relación a los instrumentos de evaluación y ponderación de la convocatoria extraordinaria del curso 2020-2021 para los estudiantes de segunda matrícula o superior, y dado el caracter fundamentalmente práctico de la asignatura, no se contempla que la nota de una de las partes evaluadas se conserven de cursos anteriores, por lo que estos alumnos deberán realizar todas las actividades de evaluación, como el resto de los alumnos.

Aclaraciones sobre la evaluación para el alumnado a tiempo parcial y necesidades educativas especiales (Escenario A):

Las adaptaciones de la evaluación para los estudiantes a tiempo parcial y necesidades educativas especiales se especificarán una vez conocida la causistica de este colectivo.

GUÍA DOCENTE

Criterios de calificación para la obtención de Matrícula de Honor (Escenario A):

Nota media igual o superior a 9. El número de MH dependerá del número de alumnos matriculados, de acuerdo con la normativa de la UCO

PLAN DE CONTINGENCIA: ESCENARIO B

El escenario B, contempla la suspensión de la actividad presencial en el aula como consecuencia de medidas sanitarias.

METODOLOGÍA

Aclaraciones generales sobre la metodología en el escenario B

La actividad docente presencial se llevará a cabo por videoconferencia (sesiones síncronas) en el horario aprobado por el Centro. Se propondrán actividades alternativas para los grupos reducidos que garanticen la adquisición de las competencias de esa asignatura.

Los seminarios tendrán lugar en aulas de informática. La asistencia tanto a las lecciones magistrales como seminarios es obligatoria.

EVALUACIÓN

Competencias	Pruebas de ejecución de tareas reales y/o simuladas	Resolución de problemas	Supuesto práctico/discusión caso clínico/discusión trabajo científico
CB10	X	X	X
CB3	X	X	
CB5	X	X	X
CE21		X	X
CE22	X		X
CE26		X	X
CE31		X	X
CE6	X	X	X
CU2	X	X	X
Total (100%)	***30%***	***40%***	***30%***
Nota mínima (*)	***4***	***4***	***4***

(*)Nota mínima para aprobar la asignatura

GUÍA DOCENTE

Herramientas Moodle	Pruebas de ejecución de tareas reales y/o simuladas	Resolución de problemas	Supuesto práctico/discusión caso clínico/discusión trabajo científico
Asistencia	X	X	X
Foro	X	X	X
Tarea	X	X	X

Método de valoración de la asistencia (Escenario B):

La asistencia es obligatoria

Aclaraciones generales sobre los instrumentos de evaluación (Escenario B):

El software adecuado para los diferentes cálculos será proporcinado por el profesor.

El trabajo práctico final representa el 60% de la nota final. Durante los seminarios los alumnos deberan resolver diferentes problemas prácticos, lo que representa el 20% de la nota, asimismo deberan constestar a ciertas tareas planteadas, lo que representa otro 20% de la nota final.

En relación a los instrumentos de evaluación y ponderación de la convocatoria extraordinaria del curso 2020-2021 para los estudiantes de segunda matrícula o superior, y dado el caracter fundamentalmente práctico de la asignatura, no se contempla que la nota de una de las partes evaluadas se conserven de cursos anteriores, por lo que estos alumnos deberán realizar todas las actividades de evaluación, como el resto de los alumnos.

Aclaraciones sobre la evaluación para el alumnado a tiempo parcial y necesidades educativas especiales (Escenario B):

Las adaptaciones de la evaluación para los estudiantes a tiempo parcial y necesidades educativas especiales se especificarán una vez conocida la causistica de este colectivo.

Criterios de calificación para la obtención de Matrícula de Honor (Escenario B):

Nota media igual o superior a 9. El número de MH dependerá del número de alumnos matriculados, de acuerdo con la normativa de la UCO