



MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

GUÍA DOCENTE

*Química Computacional /
Computational Chemistry*

Asignatura	QUÍMICA COMPUTACIONAL		
ECTS	3	Carácter	Optativa
Despliegue temporal	Anual	Lenguas	Gallego/Español/Inglés
RESULTADOS DEL APRENDIZAJE			
<ul style="list-style-type: none"> • Conocer los fundamentos de los métodos computacionales que se emplean actualmente para el cálculo de la estructura, propiedades y reactividad molecular de especies orgánicas, bio-orgánicas y organometálicas. • Adquirir destreza en el manejo del software y otras herramientas prácticas para llevar a cabo dichos cálculos. • Adquirir la capacidad de decidir y aplicar los métodos adecuados a la resolución de problemas concretos, empleando las herramientas de trabajo utilizadas a lo largo del curso. 			
CONTENIDOS			
<ul style="list-style-type: none"> • Introducción. Métodos computacionales. • Mecánica molecular. Dinámica molecular. • Métodos aproximados en mecánica cuántica: método variacional y método de perturbaciones Aproximación de Born-Oppenheimer. Función de onda polielectrónica. • Métodos semiempíricos. • Método Hartree-Fock. • Métodos avanzados (IC, MP, CC). Teoría del funcional de la densidad. Métodos de análisis de la densidad electrónica. Métodos mixtos. • Reactividad química. Superficies de energía potencial. • Tratamiento del disolvente 			
OBSERVACIONES			
<ul style="list-style-type: none"> • Se imparte presencialmente en la UAM y en la USC. • Se incluyen al final del documento las modificaciones que podría sufrir la planificación del curso dependiendo de la situación sanitaria del Covid-19. • 			
COMPETENCIAS BÁSICAS Y GENERALES			
<ul style="list-style-type: none"> • CB6 - Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de Ideas, a menudo en un contexto de investigación. • CB7 - Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio. • CB9 - Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades.. • CB10 - Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo. • CG1 - Trabajar en equipo con eficiencia en su labor profesional y/o investigadora. • CG3 - Acceder a la información necesaria (bases de datos, artículos científicos, etc.) y tener suficiente criterio para su interpretación y empleo. • CG5 - Estar bien preparados para seguir futuros estudios de doctorado en áreas multidisciplinares • CG6 - Estar bien preparados para desarrollar un trabajo en empresas tecnológicas relacionadas con la Química Orgánica • CG7 - Presentar públicamente los resultados de una investigación o un informe técnico. 			

COMPETENCIAS TRANSVERSALES		
<ul style="list-style-type: none"> • CT1 - Manejar las herramientas informáticas y las tecnologías de la información y la comunicación, así como el acceso a bases de datos en línea. • CT4 - Aplicar los conceptos, principios, teorías o modelos relacionados con la Química Orgánica a entornos nuevos o poco conocidos, dentro de contextos multidisciplinares. • CT6 - Demostrar capacidad de aprendizaje y trabajo autónomo para el desarrollo de su vida profesional. 		
COMPETENCIAS ESPECÍFICAS		
<ul style="list-style-type: none"> • CE3 - Conocer los métodos más habituales para el estudio teórico de las moléculas orgánicas y los mecanismos de reacción 		
ACTIVIDADES FORMATIVAS		
Presenciales	Horas	% Presencialidad
AF1 - Clases presenciales teóricas (lección magistral y clases expositivas)	2	100%
AF4 - Elaboración, presentación y discusión de seminarios.	3	100%
AF7. Tutorías programadas	2	100%
AF16.- Trabajo práctico de cálculo computacional supervisado	14	100%
AF8. Evaluación y/o examen	3	100%
SUBTOTAL	24	
No presenciales		
AF11. Preparación y estudio de pruebas	45	0%
AF10. Búsquedas bibliográficas y utilización de bases de datos	6	0%
TOTAL	75	
METODOLOGÍAS DOCENTES		
<ul style="list-style-type: none"> • MD1. Clases presenciales teóricas. Clases expositivas (utilización de pizarra, ordenador, cañón), complementadas con las herramientas propias de la docencia virtual. • MD2. Tutorías individuales o en grupos reducidos • MD3. Resolución de ejercicios prácticos (problemas, cuestiones tipo test, interpretación y procesamiento de la información, evaluación de publicaciones científicas, etc.) • MD4. Seminarios clases de problemas y/o conferencias de expertos • MD5. Trabajos individuales o en grupo. • MD6. Presentaciones orales de temas previamente preparadas, incluyendo debate con compañeros y profesores. • MD9. Utilización de programas informáticos especializados e internet. • MD10. Soporte docente on-line (Campus Virtual). • MD12. Realización de pruebas objetivas para corroborar la adquisición de los conocimientos, habilidades y aptitudes. • MD13. Prácticas realizadas en aula de informática 		
SISTEMAS DE EVALUACIÓN		Ponderación
SE1. Examen final		55%
SE2. Resolución de problemas y casos prácticos		20%
SE3. Realización de trabajos e informes escritos		15%
SE4. Exposición oral (trabajos, informes, problemas y casos)		10%

Modificaciones que podría sufrir la planificación del curso dependiendo de la situación sanitaria del Covid-19.

La planificación del curso podrá sufrir modificaciones en función de la situación sanitaria y de las recomendaciones docentes de cada una de las universidades.

Cualquier escenario de restricción de movilidad y, por tanto, de limitación de la presencialidad en las universidades, no supone un cambio ni de los contenidos ni de método de evaluación de la

asignatura indicado en esta ficha de programación docente, como tampoco en la planificación temporal (actividades del primer cuatrimestre / actividades del segundo cuatrimestre) del programa.

Las adaptaciones necesarias se llevarán a cabo de forma dinámica, dependiendo de la evolución de la situación sanitaria y del margen de actuación permitido por las instituciones participantes, a saber:

a) Las clases se impartirán de forma presencial, aunque se adaptarán a un formato semipresencial o completamente en línea, siguiendo las recomendaciones de las autoridades académicas y/o sanitarias.

b) Las actividades programadas se adaptarán al escenario requerido, siguiendo el criterio establecido en el apartado a.

c) Los exámenes y la exposición de trabajos se realizarán oralmente o por escrito, preferentemente forma presencial, pasando a la forma virtual si así lo dispusiesen las autoridades académicas y/o sanitarias.

Para la docencia se empleará la plataforma Moodle como repositorio de materiales y para las pruebas en línea, así como las plataformas MS Teams y GoogleMeet para las clases expositivas, de seminario, tutorías en línea, etc.