



MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA

# GUÍA DOCENTE

Química computacional /  
*Computational chemistry*

Asignatura	<b>QUÍMICA COMPUTACIONAL</b>		
ECTS	<b>3</b>	Carácter	<b>Optativa</b>
Despliegue temporal	<b>Anual</b>	Lenguas	<b>Gallego/Español/Inglés</b>
<b>RESULTADOS DEL APRENDIZAJE</b>			
<ul style="list-style-type: none"> <li>• 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.</li> <li>• Adquirir destreza en el manejo del software y otras herramientas prácticas para llevar a cabo dichos cálculos.</li> <li>• 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.</li> </ul>			
<b>CONTENIDOS</b>			
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Introducción. Métodos computacionales.</li> <li>• Mecánica molecular. Dinámica molecular.</li> <li>• Métodos aproximados en mecánica cuántica: método variacional y método de perturbaciones Aproximación de Born-Oppenheimer. Función de onda polielectrónica.</li> <li>• Métodos semiempíricos.</li> <li>• Método Hartree-Fock.</li> <li>• Métodos avanzados (IC, MP, CC). Teoría del funcional de la densidad. Métodos de análisis de la densidad electrónica. Métodos mixtos.</li> <li>• Reactividad química. Superficies de energía potencial.</li> <li>• Tratamiento del disolvente</li> </ul>			
<b>OBSERVACIONES</b>			
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Se imparte presencialmente en la UAM y en la USC</li> </ul>			
<b>COMPETENCIAS BÁSICAS Y GENERALES</b>			
<ul style="list-style-type: none"> <li>• 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.</li> <li>• 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.</li> <li>• 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.</li> <li>• 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.</li> <li>• CG1 - Trabajar en equipo con eficiencia en su labor profesional y/o investigadora.</li> <li>• CG3 - Acceder a la información necesaria (bases de datos, artículos científicos, etc.) y tener suficiente criterio para su interpretación y empleo.</li> <li>• CG5 - Estar bien preparados para seguir futuros estudios de doctorado en áreas multidisciplinares</li> <li>• CG6 - Estar bien preparados para desarrollar un trabajo en empresas tecnológicas relacionadas con la Química Orgánica</li> <li>• CG7 - Presentar públicamente los resultados de una investigación o un informe técnico.</li> </ul>			
<b>COMPETENCIAS TRANSVERSALES</b>			
<ul style="list-style-type: none"> <li>• CT1 - Manejar las herramientas informáticas y las tecnologías de la información y la comunicación, así como el acceso a bases de datos en línea.</li> </ul>			

- 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

- CE3 - Conocer los métodos más habituales para el estudio teórico de las moléculas orgánicas y los mecanismos de reacción

#### ACTIVIDADES FORMATIVAS (Elegir las más apropiadas para la asignatura y cuantificarlas debidamente)

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%
<b>SUBTOTAL</b>	<b>24</b>	
No presenciales		
AF11. Preparación y estudio de pruebas	45	0%
AF10. Búsquedas bibliográficas y utilización de bases de datos	6	0%
<b>TOTAL</b>	<b>75 h</b>	

#### METODOLOGÍAS DOCENTES

- 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 (competencias CB6, CB7, CE3)	55%
SE2. Resolución de problemas y casos prácticos (CG1, CG5, CG6, CT4)	20%
SE3. Realización de trabajos e informes escritos (CB10, CG3, CT1)	15%
SE4. Exposición oral (trabajos, informes, problemas y casos) (CB9, CG7, CT6)	10%