

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 Horas de trabajo presencial: 30
 Porcentaje de presencialidad: 40% Horas de trabajo no presencial: 45
 Plataforma virtual: <http://www3.uco.es/amoodle>

DATOS DEL PROFESORADO

Nombre: CAMACHO DELGADO, LUIS (Coordinador)
 Centro: Facultad de Ciencias
 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
 URL web: <http://www.uco.es/nanoestructuras/index.php/luisacamacho/>

Nombre: MIGUEL ROJAS, GUSTAVO DE
 Centro: Facultad de Ciencias
 Departamento: QUÍMICA FÍSICA Y TERMODINÁMICA APLICADA
 área: QUÍMICA FÍSICA
 Ubicación del despacho: Campus de Rabanales- Edificio C3-2ªPlanta
 E-Mail: q62mirog@uco.es Teléfono: 957212423
 URL web: <http://www.uco.es/nanoestructuras/index.php/gustavo-de-miguel-rojas/>

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. |

GUÍA DOCENTE

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.

OBJETIVOS

Conocer los principios de la Química Computacional y de los diferentes métodos de cálculo y sus aplicaciones en la predicción de propiedades físico-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 físico-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 adaptaciones de la metodología didáctica para los estudiantes a tiempo parcial se especificarán una vez conocida la causalidad de este colectivo.

Actividades presenciales

Actividad	Grupo completo	Grupo mediano	Total
<i>Actividades de evaluación</i>	3	-	3
<i>Lección magistral</i>	14	-	14
<i>Seminario</i>	-	13	13
Total horas:	17	13	30

Actividades no presenciales

Actividad	Total
<i>Ejercicios</i>	10
<i>Estudio</i>	35
Total horas:	45

GUÍA DOCENTE

MATERIAL DE TRABAJO PARA EL ALUMNO

Dossier de documentación
Ejercicios y problemas
Manual de la asignatura

EVALUACIÓN

Competencias	Instrumentos		
	Pruebas de ejecución de tareas reales y/o simuladas	Pruebas objetivas	Resolución de problemas
CB10	x		x
CB3	x	x	x
CB5	x		x
CE21		x	x
CE22	x	x	
CE26			x
CE31		x	x
CE6	x	x	x
CU2	x		x
Total (100%)	10%	45%	45%
Nota mínima.(*)	2	3	3

(*) Nota mínima para aprobar la asignatura.

Método de valoración de la asistencia:

Attendance to the lecture is mandatory

Aclaraciones generales sobre los instrumentos de evaluación:

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

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

El examen final representa el 45% de la nota final, y la resolución de problemas prácticos otro 45%. Los alumnos deberán interpretar trabajos bibliográficos en los que se discutan la aplicación de diferentes métodos teóricos. Esta interpretación deberán realizarla por escrito. Este apartado representa el 10% de la nota final.

Las adaptaciones de la evaluación para los estudiantes a tiempo parcial se especificarán una vez conocida la causística 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*

BIBLIOGRAFÍA

1. Bibliografía básica:



www.uco.es
facebook.com/universidadcordoba
@univcordoba

INFORMACIÓN SOBRE TITULACIONES
DE LA UNIVERSIDAD DE CÓRDOBA

uco.es/grados

GUÍA DOCENTE

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 Chemistry. 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	Actividad		
	Actividades de evaluación	Lección magistral	Seminario
1ª Semana	0	2	0
2ª Semana	0	2	0
3ª Semana	0	2	2
4ª Semana	0	2	2
5ª Semana	0	2	3
6ª Semana	0	2	3
7ª Semana	0	2	3
8ª Semana	3	0	0
Total horas:	3	14	13

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.