



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. Los detalles de la asignatura serán informados por el Campus Virtual.

Se recuerda la importancia que tienen los comités de título en su labor de verificar la coherencia de las guías docentes de acuerdo con lo recogido en la memoria de verificación del título y/o en sus planes de mejora. Por ello, **tanto la guía, como cualquier modificación** que sufra en aspectos "regulados" (competencias, metodologías, criterios de evaluación y planificación, etc..) deberá estar **informada favorablemente por el comité** de título **ANTES** de ser colgada en la aplicación web de la UVa. Se ha añadido una fila en la primera tabla para indicar la fecha en la que el comité revisó la guía.

Asignatura	SIMULACIONES COMPUTACIONALES EN QUÍMICA		
Materia	QUÍMICA AVANZADA		
Módulo			
Titulación	QUÍMICA AVANZADA		
Plan	611	Código	45975
Periodo de impartición	Segundo cuatrimestre, 4º Curso	Tipo/Carácter	OP
Nivel/Ciclo	GRADO	Curso	4º
Créditos ECTS	6		
Lengua en que se imparte	ESPAÑOL		
Profesor/es responsable/s	Carmen Barrientos Benito; Víctor Manuel Rayón Rico		
Datos de contacto (E-mail, teléfono...)	carmen.barrientos@uva.es victormanuel.rayon@uva.es		
Departamento	Química Física y Química Inorgánica		
Fecha de revisión por el Comité de Título	17-7-2023		



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 emplea conocimientos adquiridos en las asignaturas de Química Física I y Química Física II cursadas en el segundo curso de la titulación. La asignatura, también está estrechamente relacionada la Química Experimental II, pues parte de ésta se dedica a llevar a la práctica, en laboratorio, los conocimientos teóricos de Química Física I y 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 en la convocatoria ordinaria se realizará mediante una de estas dos opciones:

- Presentación de informes de las prácticas y fichas de resultados. Se valorará dentro de esta modalidad el trabajo y participación del alumno en las clases. Para que el alumno pueda acogerse a esta modalidad de evaluación se requerirá su asistencia a, al menos, el 60% de las clases.
- Examen final. El examen constará de dos partes: i) Realización de una práctica del programa. ii) Realización de un cuestionario. Esta opción será obligatoria para los alumnos que no justifiquen su asistencia a, al menos, el 60% de las clases.

La evaluación de los alumnos en la convocatoria extraordinaria se realizará mediante la realización de un examen. El examen constará de dos partes: i) Realización de una práctica del programa de la asignatura. ii) Realización de un cuestionario.

g Material docente

Es fundamental que las referencias suministradas este curso estén actualizadas y sean completas. Los profesores tienen acceso, a la **plataforma Leganto de la Biblioteca** para actualizar su bibliografía recomendada ("Listas de Lecturas"). Si ya lo han hecho, pueden poner tanto en la guía docente como en el Campus Virtual el enlace permanente a Leganto.

La Biblioteca se basa en la bibliografía recomendada en la Guía docente para adaptar su colección a las necesidades de docencia y aprendizaje de las titulaciones.

Si tienes que actualizar tu bibliografía, el enlace es el siguiente, <https://buc-uva.alma.exlibrisgroup.com/leganto/login?auth=SAML> (acceso mediante tus claves UVa). Este enlace te envía a la página de autenticación del directorio UVa, el cual te redirige a Leganto. Una vez allí, aparecerán, por defecto, las listas de lectura correspondientes a las distintas asignaturas que impartes ("instructor" en la terminología de Leganto / Alma). Desde aquí podrías añadir nuevos títulos a las listas existentes, crear secciones dentro de ellas o, por otra parte, crear nuevas listas de bibliografía recomendada.

Puedes consultar las listas de lectura existentes mediante el buscador situado en el menú de arriba a la izquierda, opción "búsqueda de listas".

En la parte superior derecha de cada lista de lectura se encuentra un botón con el signo de omisión "•••" (puntos suspensivos), a través del cual se despliega un menú que, entre otras opciones, permite "Crear un enlace compartible" que puede dirigir o bien a la lista de lectura concreta o bien al "Curso" (asignatura). Este enlace se puede indicar tanto en el apartado "g. Materiales docentes" (y subapartados) de la Guía Docente como en la sección de Bibliografía correspondiente a la asignatura en el Campus Virtual Uva.

Para resolver cualquier duda puedes consultar con la biblioteca de tu centro. [Guía de Ayuda al profesor](#)

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 o bien o en aula de informática aunque los alumnos también podrán realizar las prácticas mediante un ordenador personal si no se dispone de un aula de informática del tamaño suficiente para albergar a todos los alumnos matriculados. Se utilizará equipo informático y de proyección audiovisual. Los alumnos dispondrán en la plataforma MOODLE de la UVa de toda la información básica requerida: Programas, Guía docente, contenidos-presentaciones, ejercicios prácticos, colección de prácticas 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

Se llevará a cabo docencia presencial.

- 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 ⁽¹⁾	HORAS	ACTIVIDADES NO PRESENCIALES	HORAS
Clases teóricas	15	Preparación y estudio personal de los contenidos teóricos	10
Clases prácticas. Laboratorios	45	Preparación de Memorias de prácticas	40
		Preparación de Fichas de Resultados	40
Total presencial	60	Total no presencial	90
TOTAL presencial + no presencial			150

(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

INSTRUMENTO/PROCEDIMIENTO	PESO EN LA NOTA FINAL	OBSERVACIONES
Seguimiento continuo: Entrega de Informes de Prácticas y Fichas de Resultados	100%	
Examen final en las fechas y convocatorias fijadas por la Facultad de Ciencias	100%	

CRITERIOS DE CALIFICACIÓN

- Convocatoria ordinaria:**

La evaluación de los alumnos en la convocatoria ordinaria se realizará mediante una de estas dos opciones:

- Presentación de informes de las prácticas y fichas de resultados. Se valorará dentro de esta modalidad el trabajo y participación del alumno en las clases. Para que el alumno pueda acogerse a esta modalidad de evaluación se requerirá su asistencia a, al menos, el 60% de las clases.
- Examen final en la fecha fijada por la Facultad de Ciencias. El examen constará de dos partes: i) Realización de una práctica del programa de la asignatura. ii) Realización de un cuestionario. Esta opción será obligatoria para los alumnos que no justifiquen su asistencia a, al menos, el 60% de las clases.

- Convocatoria extraordinaria:**

La evaluación de los alumnos en la convocatoria extraordinaria se realizará mediante la realización de un examen en la fecha fijada por la Facultad de Ciencias. El examen constará de dos partes: i) Realización de una práctica del programa de la asignatura. ii) Realización de un cuestionario.

(*) Se entiende por convocatoria extraordinaria la segunda convocatoria.

Art 35.4 del ROA 35.4. La participación en la convocatoria extraordinaria no quedará sujeta a la asistencia a clase ni a la presencia en pruebas anteriores, salvo en los casos de prácticas externas, laboratorios u otras actividades cuya evaluación no fuera posible sin la previa realización de las mencionadas pruebas.

<https://secretariageneral.uva.es/wp-content/uploads/VII.2.-Reglamento-de-Ordenacion-Academica.pdf>



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.

