

Escuela de Doctorado y Estudios de Posgrado

Máster Universitario en Química

GUÍA DOCENTE DE LA ASIGNATURA :

Química orgánica computacional (2022 - 2023)

1. Datos descriptivos de la asignatura

Asignatura: Química orgánica computacional	Código: 835931920
- Centro: Escuela de Doctorado y Estudios de Postgrado - Lugar de impartición: Facultad de Ciencias. Sección de Química - Titulación: Máster Universitario en Química - Plan de Estudios: 2018 (Publicado en 2014-04-29) - Rama de conocimiento: Ciencias - Itinerario / Intensificación: - Departamento/s: Química Orgánica - Área/s de conocimiento: Química Orgánica - Curso: 1 - Carácter: Optativa - Duración: Segundo cuatrimestre - Créditos ECTS: 3,0 - Modalidad de impartición: Presencial - Horario: Enlace al horario - Dirección web de la asignatura: http://www.campusvirtual.ull.es - Idioma: Castellano e Inglés (0,15 ECTS en Inglés)	

2. Requisitos para cursar la asignatura

3. Profesorado que imparte la asignatura

Profesor/a Coordinador/a: JOSE MANUEL PADRON CARRILLO
- Grupo:
General - Nombre: JOSE MANUEL - Apellido: PADRON CARRILLO - Departamento: Química Orgánica - Área de conocimiento: Química Orgánica
Contacto - Teléfono 1: 922316502. Ext 6126 - Teléfono 2: - Correo electrónico: jmpadron@ull.es - Correo alternativo: - Web: https://www.ull.es/grupoinvestigacion/biolab/
Tutorías primer cuatrimestre:

Desde	Hasta	Día	Hora inicial	Hora final	Localización	Despacho
Todo el cuatrimestre		Miércoles	10:00	12:00	Instituto Universitario de Bio-Orgánica Antonio González - AN.2A IUBO	P1.017
Todo el cuatrimestre		Jueves	10:00	12:00	Instituto Universitario de Bio-Orgánica Antonio González - AN.2A IUBO	P1.017
Todo el cuatrimestre		Viernes	10:00	12:00	Instituto Universitario de Bio-Orgánica Antonio González - AN.2A IUBO	P1.017

Observaciones: Con el fin garantizar y optimizar el tiempo de atención al alumnado, las tutorías deben solicitarse previamente por correo electrónico en la dirección jmpadron@ull.es Las tutorías serán preferentemente en línea y para ello se hará uso de Google Meet o del correo electrónico, utilizando el correo institucional ("alu") proporcionado por la ULL. El enlace Meet para tutorías estará disponible en el Aula virtual de la asignatura.

Tutorías segundo cuatrimestre:

Desde	Hasta	Día	Hora inicial	Hora final	Localización	Despacho
Todo el cuatrimestre		Miércoles	10:00	12:00	Instituto Universitario de Bio-Orgánica Antonio González - AN.2A IUBO	P1.017
Todo el cuatrimestre		Jueves	10:00	12:00	Instituto Universitario de Bio-Orgánica Antonio González - AN.2A IUBO	P1.017
Todo el cuatrimestre		Viernes	10:00	12:00	Instituto Universitario de Bio-Orgánica Antonio González - AN.2A IUBO	P1.017

Observaciones: Con el fin garantizar y optimizar el tiempo de atención al alumnado, las tutorías deben solicitarse previamente por correo electrónico en la dirección jmpadron@ull.es Las tutorías serán preferentemente en línea y para ello se hará uso de Google Meet o del correo electrónico, utilizando el correo institucional ("alu") proporcionado por la ULL. El enlace Meet para tutorías estará disponible en el Aula virtual de la asignatura.

4. Contextualización de la asignatura en el plan de estudio

Bloque formativo al que pertenece la asignatura: **Química Orgánica**

Perfil profesional:

5. Competencias

Básica

CB06 - 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

CB07 - 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

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

Específica

CE06 - Utilizar programas informáticos que permitan plantear y resolver problemas de Química Computacional, Modelización molecular y Quimiometría

CE10 - Manejar los conceptos básicos y la metodología empleada en química computacional

6. Contenidos de la asignatura

Contenidos teóricos y prácticos de la asignatura

Módulo teórico

1. Introducción. Niveles de cálculo
2. Mecánica Molecular
3. Cálculos Semiempíricos
4. Cálculos de alto nivel
5. La Teoría de los orbitales moleculares
 - 5.1 Las funciones de base
 - 5.2 Cálculo de frecuencias, Estados de transición, IRC
 - 5.3 Termoquímica
 - 5.3 Solvatación

6. El problema de la correlación electrónica
7. Teoría del Funcional de la Densidad
8. Tipos de funcionales
9. Postprocesado de los resultados.
10. Los orbitales naturales de enlace NBO
11. Teoría de los átomos en las moléculas AIM
12. Otros modelos de análisis

Módulo práctico:

Se propondrán ejercicios cuya base se sustentará en los siguientes temas:

Empleando el programa ORCA

1. Orbitales moleculares: Visión y significado
2. La optimización de una estructura
3. Cálculo de frecuencias de vibración y determinación de la energía libre
4. Los mecanismos de reacción: Coordenadas de reacción y puntos significativos de la misma
5. Influencia del disolvente en el mecanismo de reacción
7. Análisis según el método NBO
8. Análisis según el método AIM
9. Empleo del programa Multiwfn para analizar la densidad electrónica. Cálculos AIM, ELF, etc.
10. Simplificaciones y análisis de sistemas complejos de interés biológico.

Actividades a desarrollar en otro idioma

7. Metodología y volumen de trabajo del estudiante

Descripción

La metodología docente combinará las sesiones magistrales con el trabajo activo, frente al ordenador, del alumnado. Se intentará minimizar los contenidos más teóricos a favor de aquellos que puedan resultar más prácticos para el uso futuro por parte del alumnado.

Actividades formativas en créditos ECTS, su metodología de enseñanza-aprendizaje y su relación con las competencias que debe adquirir el estudiante

Actividades formativas	Horas presenciales	Horas de trabajo autónomo	Total horas	Relación con competencias
Clases teóricas	10,00	0,00	10,0	[CE10], [CB10], [CB06]
Clases prácticas (aula / sala de demostraciones / prácticas laboratorio)	18,00	0,00	18,0	[CE10], [CE06], [CB10], [CB07], [CB06]
Asistencia a tutorías	2,00	0,00	2,0	[CE10], [CE06], [CB10], [CB07], [CB06]

Preparación de seminarios, elaboración de memorias y/o informes de las prácticas realizadas, resolución de ejercicios que le haya entregado el profesor, preparación de debates, preparación de exposición oral.	0,00	21,00	21,0	[CE10], [CE06], [CB10], [CB07], [CB06]
Estudio autónomo	0,00	18,00	18,0	[CE10], [CE06], [CB10], [CB07]
Lecturas recomendadas, búsquedas bibliográficas u otras actividades en biblioteca o similares	0,00	6,00	6,0	[CB10], [CB07], [CB06]
Total horas	30,00	45,00	75,00	
Total ECTS			3,00	

8. Bibliografía / Recursos

Bibliografía Básica

Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods. James B. Foresman and AEleen Frisch. Gaussian Inc., Wallingford, CT USA. Third Edition, 2015. ISBN. 978-1-935522-03-4

Bibliografía Complementaria

Otros Recursos

9. Sistema de evaluación y calificación

Descripción

El alumnado que se acoja a la modalidad de EU (evaluación única) lo tendrá que comunicar al profesorado responsable de la asignatura, por correo electrónico, en el plazo de un mes desde el inicio del cuatrimestre correspondiente (ver art. 5.4 y 5.5 del REC). La evaluación única se llevará a cabo en las dos convocatorias de la asignatura. Consistirá en una prueba de evaluación escrita de todos los temas desarrollados.

El sistema de evaluación de esta asignatura es de **Evaluación Continua** para todas la convocatorias.

Evaluación continua

- A) Control de asistencia y participación activa en todas las actividades de la asignatura 35%
B) Evaluación de los trabajos, proyectos y ejercicios realizados a propuesta del docente 65%

Estrategia Evaluativa

Tipo de prueba	Competencias	Criterios	Ponderación
Trabajos y proyectos	[CE10], [CE06], [CB10], [CB07], [CB06]	Evaluación de los trabajos, proyectos y ejercicios realizados a propuesta del docente	65,00 %
Técnicas de observación	[CE10], [CE06], [CB10], [CB07], [CB06]	Control de asistencia y participación activa en todas las actividades de la asignatura	35,00 %

10. Resultados de Aprendizaje

Al final de esta asignatura se espera que el estudiante sea capaz de:

- Decidir la aplicabilidad de la química computacional a un problema práctico concreto
- Elegir y aplicar el nivel de cálculo necesario para cada tarea.
- Expresar los resultados de los cálculos en lenguaje químico convencional.

11. Cronograma / calendario de la asignatura

Descripción

El cronograma es orientativo y podrá variar en función de las necesidades del curso.

Primer cuatrimestre					
Semana	Temas	Actividades de enseñanza aprendizaje	Horas de trabajo presencial	Horas de trabajo autónomo	Total
Semana 1:			0.00	0.00	0.00
Semana 2:			0.00	0.00	0.00
Semana 3:			0.00	0.00	0.00
Semana 4:			0.00	0.00	0.00
Semana 5:			0.00	0.00	0.00
Semana 6:			0.00	0.00	0.00

Semana 7:			0.00	0.00	0.00
Semana 8:			0.00	0.00	0.00
Semana 9:			0.00	0.00	0.00
Semana 10:			0.00	0.00	0.00
Semana 11:			0.00	0.00	0.00
Semana 12:			0.00	0.00	0.00
Semana 13:			0.00	0.00	0.00
Semana 14:			0.00	0.00	0.00
Semana 15:			0.00	0.00	0.00
Semana 16 a 18:			0.00	0.00	0.00
Total			0.00	0.00	0.00
Segundo cuatrimestre					
Semana	Temas	Actividades de enseñanza aprendizaje	Horas de trabajo presencial	Horas de trabajo autónomo	Total
Semana 1:	Temas 1, 2 y 3 Prácticas 1, 2 y 3	2 clases de teoría 3 clases prácticas	4.50	6.75	11.25
Semana 2:	Temas 4 y 5 Prácticas 4 y 5	2 clases de teoría 3 clases prácticas	7.50	11.25	18.75
Semana 3:	Temas 6, 7, 8 Prácticas 6, 7 y 8	1 clases teoría 3 clases prácticas 1 tutoría	7.50	11.25	18.75
Semana 4:	Tema 9, 10, 11, 12 Prácticas 9 y 10	2 clase de teoría 2 clases prácticas 1 tutoría	7.50	11.25	18.75
Semana 5:	Prácticas 11 y 12	2 clases de prácticas	3.00	4.50	7.50
Semana 6:			0.00	0.00	0.00
Semana 7:			0.00	0.00	0.00
Semana 8:			0.00	0.00	0.00
Semana 9:			0.00	0.00	0.00
Semana 10:			0.00	0.00	0.00

Semana 11:			0.00	0.00	0.00
Semana 12:			0.00	0.00	0.00
Semana 13:			0.00	0.00	0.00
Semana 14:			0.00	0.00	0.00
Semana 15:			0.00	0.00	0.00
Semana 16 a 18:			0.00	0.00	0.00
Total			30.00	45.00	75.00