

Escuela de Doctorado y Estudios de Posgrado

Máster Universitario en Química

GUÍA DOCENTE DE LA ASIGNATURA :

**Química orgánica computacional
(2023 - 2024)**

1. Datos descriptivos de la asignatura

Asignatura: Química orgánica computacional	Código: 835931920
<ul style="list-style-type: none">- 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 de matrícula y calificación

3. Profesorado que imparte la asignatura

Profesor/a Coordinador/a: SERGIO JOAQUÍN ÁLVAREZ MÉNDEZ
- Grupo:
General <ul style="list-style-type: none">- Nombre: SERGIO JOAQUÍN- Apellido: ÁLVAREZ MÉNDEZ- Departamento: Química Orgánica- Área de conocimiento: Química Orgánica
Contacto <ul style="list-style-type: none">- Teléfono 1: 922318670- Teléfono 2:- Correo electrónico: salvmen@ull.es- Correo alternativo:- Web: https://portalciencia.ull.es/investigadores/82561/detalle
Tutorías primer cuatrimestre:

Desde	Hasta	Día	Hora inicial	Hora final	Localización	Despacho
Todo el cuatrimestre		Lunes	08:00	10:00	Sección de Química - AN.3F	Laboratorio AICHEM (Antiguo Patrones Toxicológicos del SEGAI)
Todo el cuatrimestre		Martes	08:00	10:00	Sección de Química - AN.3F	Laboratorio AICHEM (Antiguo Patrones Toxicológicos del SEGAI)
Todo el cuatrimestre		Miércoles	08:00	10:00	Sección de Química - AN.3F	Laboratorio AICHEM (Antiguo Patrones Toxicológicos del SEGAI)

Observaciones: Con el fin de optimizar el tiempo de atención al alumnado, las tutorías deben solicitarse previamente por correo electrónico en la dirección salvmen@ull.edu.es. Las tutorías pueden realizarse de forma no presencial, previa solicitud por correo electrónico, a través de Google Meet en el mismo horario que las presenciales. Se puede acudir a tutorías, presenciales o no, en otro horario, previo acuerdo con el profesor.

Tutorías segundo cuatrimestre:

Desde	Hasta	Día	Hora inicial	Hora final	Localización	Despacho
Todo el cuatrimestre		Lunes	08:00	10:00	Sección de Química - AN.3F	Laboratorio AICHEM (Antiguo Patrones Toxicológicos del SEGAI)
Todo el cuatrimestre		Martes	08:00	10:00	Sección de Química - AN.3F	Laboratorio AICHEM (Antiguo Patrones Toxicológicos del SEGAI)
Todo el cuatrimestre		Miércoles	08:00	10:00	Sección de Química - AN.3F	Laboratorio AICHEM (Antiguo Patrones Toxicológicos del SEGAI)

Observaciones: Con el fin de optimizar el tiempo de atención al alumnado, las tutorías deben solicitarse previamente por correo electrónico en la dirección salvmen@ull.edu.es. Las tutorías pueden realizarse de forma no presencial, previa solicitud por correo electrónico, a través de Google Meet en el mismo horario que las presenciales. Se puede acudir a tutorías, presenciales o no, en otro horario, previo acuerdo con el profesor.

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: conceptos de mecánica cuántica para química orgánica; desarrollo de modelos teóricos y uso de cálculos y simulaciones computacionales dentro de un proyecto de investigación en química orgánica; descripción general de la *model chemistry* y niveles de cálculo (mecánica molecular, dinámica molecular, cálculos ab-initio y Teoría del Funcional de la Densidad).
2. Tipos de cálculos básicos y presentación de resultados (energía, optimización de geometría y frecuencias); técnica ONIOM para el modelado de sistemas complejos.
3. Superficies de energía potencial y localización de estructuras de transición.
4. Modelado de compuestos y reacciones en disolución.
5. Mecanismos de reacción y cálculo de la coordenada intrínseca de reacción (IRC).
6. Modelado de estados excitados.

7. Predicción de propiedades químicas y de espectros UV/Visible, IR y RMN de moléculas orgánicas.
8. Introducción a la bioquímica computacional y a la química organometálica computacional.

Módulo práctico:

1. Aplicación de diferentes modelos para la predicción de una estructura.
2. Energía, orbitales moleculares y distribución de cargas atómicas; optimización de estructuras y cálculo de frecuencias; aplicación del cálculo ONIOM para la determinación del confórmero más estable.
3. Estructuras de transición: optimización y aplicación en el discernimiento de mecanismos de reacción.
4. Comparación de la energía libre de confórmeros en fase gas y en disolución; comparación de la solubilidad de moléculas orgánicas en diferentes disolventes; predicción de la energía libre de Gibbs en reacciones orgánicas acuosas.
5. Predicción de la regioselectividad en reacciones orgánicas y efecto de grupos funcionales.
6. Cálculo y aplicaciones de energías y estados de excitación en compuestos aromáticos.
7. Predicción y comparativa de espectros de moléculas orgánicas sencillas en fase gas y en disolución; efecto de los sustituyentes en el desplazamiento químico en RMN.
8. Pautas para la búsqueda bibliográfica en revistas especializadas.

Actividades a desarrollar en otro idioma

Los softwares, la bibliografía y las lecturas recomendadas se encuentran en inglés.

7. Metodología y volumen de trabajo del estudiante

Descripción

La metodología docente combinará las sesiones magistrales con el trabajo activo del alumnado frente al ordenador, minimizando en la medida de lo posible los contenidos teóricos y priorizando los prácticos mediante la realización de ejercicios.

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. Foresman, J. B. and Frisch A. Gaussian, Inc., Pittsburgh, USA. Second Edition, 1996. ISBN 0-9636769-3-8.
- Computational Organic Chemistry. Bachrach, S. M. John Wiley & Sons, Inc, Hoboken, New Jersey, USA. Second Edition, 2014. ISBN 978-1-118-29192-4. DOI:10.1002/9781118671191

Bibliografía Complementaria

- Computational Organometallic Chemistry. Cundari, T. R. Marcel Dekker, Inc., New York, USA. First Edition, 2001. ISBN 0-8247-0478-9.
- An Introduction to Computational Biochemistry. Tsai, C. S. Wiley-Liss, Inc., New York., USA. First Edition, 2002. ISBN 0-471-40120-X.

Otros Recursos

9. Sistema de evaluación y calificación

Descripción

El sistema de evaluación de esta asignatura es de **Evaluación Continua** para todas las convocatorias:

- 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 %.

El alumnado que se acoga a la modalidad de Evaluación Única lo tendrá que comunicar al profesorado responsable de la asignatura, por correo electrónico, antes de haberse presentado a las actividades que computen el 50% de la evaluación continua. La evaluación única se llevará a cabo en las dos convocatorias de la asignatura. Consistirá en una prueba de evaluación teórico-práctica de todos los temas desarrollados.

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 teóricos 1 y 2. Aplicaciones prácticas de los temas 1 y 2.	2 clases de teoría. 2 clases prácticas.	6.00	9.00	15.00
Semana 2:	Tema 3. Aplicaciones prácticas del tema 3.	2 clases de teoría. 3 clases prácticas.	7.50	11.25	18.75
Semana 3:	Tema 4. Aplicaciones prácticas del tema 4.	1 clase de teoría. 2 clases prácticas.	4.50	6.75	11.25
Semana 4:	Tema 5 y 6. Aplicaciones prácticas de los temas 5 y 6.	1 clase de teoría. 3 clases prácticas. 1 tutoría.	7.50	11.25	18.75

Semana 5:	Temas teóricos 7 y 8. Aplicaciones prácticas de los temas 7 y 8.	1 clases de teoría. 1 clases práctica. 1 tutoría.	4.50	6.75	11.25
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