



Denominación de la asignatura: (Codificación o numeración y nombre)						
Química computacional de compuestos bio-orgánicos						
1	Créditos ECTS:	Carácter:	FB: Formación Básica; OB: Obligatoria; OP: Optativa; TF: Trabajo Fin de Carrera; PE: Practicas externas; MX: Mixto			
	3	FB	OB	OP	TF	PE MX
2	Descripción de la ubicación dentro del plan de estudios así como sobre su duración:					
	Segundo semestre					
3	Requisitos previos:					
	Los genéricos de la titulación Se requiere que el alumno conozca los conceptos básicos de Química Física					
4	Competencias: (indicar las competencias que se desarrollan, de las descritas en el punto 3.2.)					
	G1 a G10 E1-E5, E-7, E-9, E11, E15					
5	Actividades formativas con su contenido en ECTS, su metodología de enseñanza y aprendizaje y su relación con las competencias a desarrollar:					
	Actividades Presenciales	ECTS (horas)	Actividades no Presenciales	ECTS (horas)		
	Clases teóricas	0,2 (5)	Preparación y estudio personal de los contenidos teóricos	0,8 (20)		
	Clases prácticas de ordenador y seminarios	0,8 (20)	Preparación y resolución de ejercicios, problemas, presentaciones...	0,4 (10)		
	Asistencia a tutorías	0,1 (2,5)	Estudio y preparación de exámenes	0,6 (15)		
	Realización de exámenes y controles periódicos	0,1 (2,5)				
	Total horas presenciales	1,2 (30)	Total horas no presenciales	1,8 (45)		
	Total volumen de trabajo	3 (75)				
5.1	Resultados de aprendizaje:					
	<p>Conocer las técnicas avanzadas de la Química Computacional y su aplicación al estudio de sistemas orgánicas y de interés farmacológico</p> <p>Conocer las técnicas computacionales para el estudio de la estructura molecular.</p> <p>Conocer las técnicas de simulación actuales de aplicación en fases condensadas.</p> <p>Conocer las técnicas computacionales para relacionar cuantitativamente la estructura molecular y las propiedades físico-químicas de los sistemas bio-orgánicos.</p>					
6	Sistemas de evaluación:					
	La evaluación de los alumnos se realizará: a) Seguimiento continuo, evaluación de problemas, trabajos u otras actividades (40%); b) Evaluación de conocimientos por medio de examen (30%); Evaluación de conocimientos prácticos (30%)					
7	Contenidos de la asignatura: (Breve descripción de la asignatura)					
	Análisis conformacional avanzado en moléculas orgánicas y de interés biológico. Técnicas de dinámica molecular. Técnicas de simulación de fases condensadas. Modelización de disolventes. Relaciones cuantitativas estructura-actividad (QSAR). Introducción al diseño de fármacos asistido por ordenador.					
8	Comentarios adicionales: (Cualquier aspecto, no descrito en los apartados anteriores)					