



32528 - MÉTODOS DE LA QUÍMICA TEÓRICA II

Información de la asignatura

Código - Nombre: 32528 - MÉTODOS DE LA QUÍMICA TEÓRICA II

Titulación: 616 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2013)
651 - Máster Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelización Computacional
666 - Programa de Doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional
748 - Máster Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelización Computacional
751 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional Europeo
762 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2021)

Centro: 104 - Facultad de Ciencias

Curso Académico: 2024/25

1. Detalles de la asignatura

1.1. Materia

Métodos de la Química Teórica II.

1.2. Carácter

616 - Obligatoria
762 - Obligatoria
666 - Complementos de Formación
651 - Obligatoria
748 - Obligatoria
751 - Obligatoria

1.3. Nivel

616 - Máster (MECES 3)
666 - Doctorado (MECES 4)
762 - Máster (MECES 3)
651 - Máster (MECES 3)
748 - Máster (MECES 3)
751 - Máster (MECES 3)

1.4. Curso

751 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional Europeo: 1
666 - Programa de Doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional: 99
651 - Máster Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelización Computacional: 1
748 - Máster Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelización Computacional: 1
762 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2021): 1
616 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2013): 1

1.5. Semestre

Anual

1.6. Número de créditos ECTS

5.0

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	08/07/2024	1/4
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	1/4	

1.7. Idioma

English

1.8. Requisitos previos

No hay.

1.9. Recomendaciones

No hay.

1.10. Requisitos mínimos de asistencia

La asistencia a las clases es obligatoria.

1.11. Coordinador/a de la asignatura

<https://autoservicio.uam.es/paginas-blancas/>

1.12. Competencias y resultados del aprendizaje

1.12.1. Competencias / Resultados del proceso de formación y aprendizaje

BÁSICAS Y GENERALES:

CB6 - 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.

CB7 - 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.

CB8 - Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios.

CB9 - Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades.

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.

CG01 - Los estudiantes son capaces de fomentar, en contextos académicos y profesionales, el avance tecnológico y científico dentro de una sociedad basada en el conocimiento y en el respeto a: a) los derechos fundamentales y de igualdad de oportunidades entre hombres y mujeres, b) los principios de igualdad de oportunidades y accesibilidad universal de las personas con discapacidad y c) los valores propios de una cultura de paz y de valores democráticos.

CG02 - Los estudiantes son capaces de resolver problemas y tomar decisiones de cualquier índole bajo el compromiso con la defensa y práctica de las políticas de igualdad.

TRANSVERSALES:

CT01 - El/la estudiante es capaz de adaptarse a diferentes entornos culturales demostrando que responde al cambio con flexibilidad.

ESPECÍFICAS:

CE01 - Los estudiantes demuestran su conocimiento y comprensión de los hechos aplicando conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química Teórica y Modelización Computacional.

CE04 - Comprende los fundamentos teóricos y prácticos de técnicas computacionales con las que puede analizar la estructura electrónica, morfológica y estructural de un compuesto e interpreta adecuadamente los resultados.

CE12 - Está familiarizado con los postulados fundamentales de la Mecánica Cuántica necesarios para un buen entendimiento de los métodos más comunes utilizados en química cuántica.

CE16 - El/la estudiante es capaz de discernir entre los diferentes métodos existentes y cómo seleccionar el más adecuado para cada problema.

1.12.2. Resultados de aprendizaje

Esta es la segunda asignatura del Máster dedicada a métodos de la Química Teórica y Computacional. En este caso el acento se pone en los métodos para el estudio de sistemas moleculares de gran tamaño y con un gran número de conformaciones accesibles. Por ello la asignatura se centra en tres grandes objetivos:

- Cálculo de la energía para sistemas de gran tamaño: Campos de fuerza, métodos de continuo y métodos QM/MM
- Exploración del espacio configuracional: Métodos de dinámica molecular clásica y cuántica
- Obtención de propiedades dinámicas a través de simulaciones de de dinámica molecular

1.12.3. Objetivos de la asignatura

Más específicamente, se plantean una serie de objetivos particulares en forma de preguntas:

- ¿Cómo podemos describir sistemas moleculares muy grandes, tales como proteínas o ácidos nucleicos?
- ¿Cómo describir sistemas moleculares muy grandes cuando se necesita una descripción cuántica de parte de él?

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	08/07/2024	2/4
Firmado por:	Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas			
Url de Verificación:		Página:	2/4	

- ¿Cómo describir interacciones intermoleculares en sistemas grandes?
- ¿Cómo describir moléculas en disolución?
- ¿Cuáles son las ventajas y desventajas de los modelos de continuo?
- ¿Cómo obtener propiedades promedio y de equilibrio en sistemas con muchas configuraciones accesibles?
- ¿Cómo se pueden calcular propiedades dependientes del tiempo?

1.13. Contenidos del programa

Unidad 1. Interacciones intermoleculares: Introducción. Interacciones de largo alcance. Interacciones repulsivas. Interacción total, modelos y limitaciones

Unidad 2. Campos de fuerza: Introducción. Términos energéticos. Ejemplos. Validación

Unidad 3. Métodos de simulación. Introducción. Descripción del sistema. Dinámica Molecular. Cuestiones prácticas

Unidad 4. Geometría molecular y energía. Superficies de energía potencial (PES). Exploración y caracterización de puntos estacionarios. Propiedades moleculares. Espacio conformacional de moléculas biológicas

Unidad 5. Modelos de solvatación aplicados en Mecánica Cuántica; Modelos discretos; Modelos continuos; Modelos mixtos discreto-continuos o semicontinuos; Modelos híbridos QM/MM; Aplicaciones

Unidad 6. Técnicas de simulación por ordenador basadas en métodos estadísticos. Introducción; Análisis de Modos Normales; Cálculo de propiedades termodinámicas y estructurales; Energía libre de Gibbs y Helmholtz; Energía libre y funciones de partición; Energía libre y promedios; "The Particle Insertion"; "Free Energy Perturbation"; "Thermodynamic Integration"; "Slow Growth"; "Umbrella Sampling"; Problemas y limitaciones

Unidad 7. Métodos de simulación avanzados: Introducción. Dinámica Molecular Ab Initio. Dinámica Molecular Carr-Parrinello

Unidad 8. Métodos avanzados para el cálculo de energía libre. Métodos basados en caminos físicos: nudged elastic band, dimer method, string method, growing string method, transition path sampling, Parallel Tempering, Replica Exchange MD. Métodos basados en el "History-dependent biasing potential": Metadynamics (MTD) y Parodynamics (PD).

Prácticas:

Práctica 1. Obtención de parámetros para un campo de fuerza mediante cálculo cuánticos

Práctica 2. Simulación de Dinámica Molecular de disoluciones acuosas

Práctica 3. Simulación de Dinámica Molecular de una proteína

Práctica 4. Reactividad: cálculo de un perfil de reacción en fase gas

Práctica 5. Reactividad: cálculo de un perfil de reacción en disolución

Práctica 6. Cálculo de efectos cinéticos isotópicos

1.14. Referencias de consulta

- M. P. Allen, D. J. Tildesley. *Computer Simulation of Liquids*. Oxford University Press, New York 1989
- A. R. Leach. *Molecular Modelling*. Longman, London, 1996
- D. Frenkel & B. Smit. *Understanding Molecular Simulation*. Academic Press, San Diego, 1996
- A. Stone. *The Theory of Intermolecular Forces*. Oxford University Press, 2013

2. Metodologías docentes y tiempo de trabajo del estudiante

2.1. Presencialidad

	#horas
Porcentaje de actividades presenciales (mínimo 33% del total)	35
Porcentaje de actividades no presenciales	90

2.2. Relación de actividades formativas

Actividades presenciales	Nº horas
Clases teóricas en aula	20
Seminarios/ Clases prácticas	15
Prácticas clínicas	
Prácticas con medios informáticos	
Prácticas de campo	
Prácticas de laboratorio	
Prácticas externas y/o practicum	
Trabajos académicamente dirigidos	
Tutorías	

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	08/07/2024	3/4
Firmado por:	Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas			
Url de Verificación:		Página:	3/4	

Actividades de evaluación	
Otras	

Lección Magistral: El profesor expondrá los contenidos del curso en sesiones presenciales o por video conferencia de dos horas basándose en los materiales docentes publicados en la plataforma Moodle.

Lección Práctica: El profesor expondrá ejercicios basados en los conceptos estudiados para ponerlos en práctica mediante cálculos.

Docencia en red. Se utilizará las distintas herramientas que ofrece la plataforma Moodle (<https://posgrado.uam.es>).
Publicación de contenidos de la asignatura, herramientas de trabajo en grupo: foros de discusión y wiki, correo electrónico

Tutorías. El profesor realizará tutorías individuales o con grupos reducidos sobre cuestiones puntuales que los estudiantes puedan plantear.

Seminarios online. Con posterioridad a las clases expositivas, se realizarán seminarios online para discutir los resultados obtenidos en los trabajos propuestos, las dudas sobre las metodologías empleadas, y supervisar la preparación de los informes elaborados por los estudiantes.

3. Sistemas de evaluación y porcentaje en la calificación final

3.1. Convocatoria ordinaria

Los conocimientos adquiridos por el estudiante serán evaluados a lo largo de todo el curso, intentando que el estudiante avance de forma regular y constante en la asimilación de los contenidos de la asignatura.

La nota final de la asignatura se basará en los ejercicios, trabajos y discusión de los mismos que se irá realizando durante el curso. Los ejercicios se basarán en los contenidos de las clases prácticas del curso.

3.1.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Examen final (máximo 70% de la calificación final o el porcentaje que figure en la memoria)	
Evaluación continua	

3.2. Convocatoria extraordinaria

Se realizará un examen final único que será de carácter teórico y que abarcará los contenidos de toda la asignatura. La puntuación en la convocatoria extraordinaria se realizará en base a los siguientes porcentajes:

- 70% el examen final,
- 30 % la realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura.

3.2.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Examen final (máximo 70% de la calificación final o el porcentaje que figure en la memoria)	70
Evaluación continua	30

4. Cronograma orientativo

Por favor, comprobar el horario oficial publicado en la página web del Máster.

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	08/07/2024	4/4
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	4/4	