FICHA IDENTIFICATIVA

Datos de la Asignatura

Código	43993
Nombre	Métodos de la Química Teórica II
Ciclo	Máster
Créditos ECTS	5.0
Curso académico	2022 - 2023

Titulación(es)

Titulación	Centro	Curso	Periodo
2184 - Máster Universitario en Química Teórica y Modelización Computacional	Facultad de Química	1	Anual
3156 - Doct. Química Teórica y Modelización Comput.	Escuela de Doctorado	0	Primer cuatrimestre

Materias

Titulación	Materia	Carácter
2184 - Máster Universitario en Química Teórica y Modelización Computacional	2 - Métodos	Obligatoria

Coordinación

Nombre	Departamento
SANCHEZ MARIN, JOSE	315 - Química Física
TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO	315 - Química Física

RESUMEN

CONOCIMIENTOS PREVIOS

Relación con otras asignaturas de la misma titulación

No se han especificado restricciones de matrícula con otras asignaturas del plan de estudios.

Otros tipos de requisitos

No hay requisitos previos.

COMPETENCIAS (RD 1393/2007) // RESULTADOS DEL APRENDIZAJE (RD 822/2021)

RESULTADOS DE APRENDIZAJE (RD 1393/2007) // SIN CONTENIDO (RD 822/2021)

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 dinámica molecular

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?
- ¿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?

DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS

1. Unidad 1. Interacciones intermoleculares:

Introducción. Interacciones de largo alcance. Interacciones repulsivas. Interacción total, modelos y limitaciones

2. Unidad 2. Campos de fuerza

Introducción. Términos energéticos. Ejemplos. Validación

3. Unidad 3. Métodos de simulación

Introducción. Descripción del sistema. Dinámica Molecular. Cuestiones prácticas

4. Unidad 4. Geometría molecular y energía

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

5. Unidad 5. Modelos de solvatación aplicados en Mecánica Cuántica

Modelos discretos; Modelos continuos; Modelos mixtos discreto-continuos o semicontinuos; Modelos híbridos QM/MM; Aplicaciones

6. 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; Potential of Mean Force; Problemas y limitaciones

7. Unidad 7. Métodos de simulación avanzados

Introducción. Dinámica Molecular Ab Initio. Dinámica Molecular Carr-Parrinello

8. 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 Paradynamics (PD).

9. 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 d euna proteína

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

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

Práctica 6. Cálculo de efectos cinéticos isotópicos

VOLUMEN DE TRABAJO

ACTIVIDAD	Horas	% Presencial
Clases de teoría	20,00	100
Seminarios	15,00	100
Elaboración de trabajos individuales	30,00	0
Estudio y trabajo autónomo	40,00	0
Preparación de clases prácticas y de problemas	20,00	0
TOTAL	**125,00**	

METODOLOGÍA DOCENTE

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

Docencia en red. Se utilizará las distintas herramientas que ofrece la plataforma moodle (http://www.uam.es/moodle). 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.

EVALUACIÓN

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.

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.

REFERENCIAS

Básicas

- - 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