

**FICHA IDENTIFICATIVA****Datos de la Asignatura**

Código	43997
Nombre	Dinámica química y molecular y simulación y modelización por ordenador
Ciclo	Máster
Créditos ECTS	9.0
Curso académico	2022 - 2023

Titulación(es)

Titulación	Centro	Curso	Periodo
2184 - Máster Universitario en Química Teórica y Modelización Computacional	Facultad de Química	2	Anual

Materias

Titulación	Materia	Carácter
2184 - Máster Universitario en Química Teórica y Modelización Computacional	4 - Modelización Avanzada y Aplicaciones	Obligatoria

Coordinación

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

RESUMEN

La edición número 13 del Curso Intensivo del Máster en Química Teórica y Modelización Computacional tendrá lugar en la Universidad de Perugia del 3 al 28 de septiembre de 2018.

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)**2184 - Máster Universitario en Química Teórica y Modelización Computacional**

- Que los/las 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.
- Que los/las 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.
- Que los/las 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.
- Que los/las estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo
- 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.
- Los estudiantes deben ser 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.
- El estudiante es capaz de adaptarse a diferentes entornos culturales.
- El estudiante demuestra su conocimiento y comprensión de los hechos aplicando conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química Teórica y Modelización Computacional.
- El estudiante conoce teorías y métodos de cálculo asociados a procesos cinéticos y evalúa críticamente su aplicabilidad al cálculo de constantes de velocidad.
- El estudiante está familiarizado con las técnicas computacionales que, basadas en la mecánica y dinámica molecular, son la base del diseño de moléculas de interés en campos tales como farmacología, petroquímica, etc.

2193 - Máster Universitario EM Química Teórica y Modelización Computacional

- Que los/las 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.



- Que los/las 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.
- Que los/las 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.
- Que los/las estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo
- 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.
- Los estudiantes deben ser 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.
- El estudiante es capaz de adaptarse a diferentes entornos culturales.
- El estudiante demuestra su conocimiento y comprensión de los hechos aplicando conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química Teórica y Modelización Computacional.
- El estudiante conoce teorías y métodos de cálculo asociados a procesos cinéticos y evalúa críticamente su aplicabilidad al cálculo de constantes de velocidad.
- El estudiante está familiarizado con las técnicas computacionales que, basadas en la mecánica y dinámica molecular, son la base del diseño de moléculas de interés en campos tales como farmacología, petroquímica, etc.

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

- Esbozar los principios básicos del enfoque del paquete de ondas dependiente del tiempo, que se ejemplificará a través de la simulación de propagaciones simples de paquetes de ondas en una dimensión
- Conocer los fundamentos de la Dinámica Molecular clásica y los pasos para preparar los cálculos MD
- Enfoque de paquete de onda dependiente del tiempo: obtención de información de dispersión-- Visión general de las teorías de las velocidades de reacción: las propiedades básicas de las reacciones elementales obtenidas a partir de experimentos de cinética de reacción -- El método de la trayectoria cuasi-clásica (principios y aplicaciones) -- Descripción teórica de la transferencia colisional de energía



DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS

1. 1.

Metodos mixtos cuánticos-clásicos en dinámica de colisiones.

Fuerzas intermoleculares, modelos de solvente explícito y cálculos QM/MM

Teoría de la velocidad de reacción.

El método QCT . De los principios a las aplicaciones en Dinámica de Reacciones.

Dinámica Molecular: Fundamentos y simulación de fisiorción de gases.

Aproximación de paquetes de ondas dependientes del tiempo: Obteniendo información de la dispersión ("scattering").

VOLUMEN DE TRABAJO

ACTIVIDAD	Horas	% Presencial
Clases de teoría	56,00	100
Seminarios	7,00	100
Elaboración de trabajos individuales	60,00	0
Estudio y trabajo autónomo	66,00	0
Preparación de clases prácticas y de problemas	36,00	0
TOTAL	225,00	

METODOLOGÍA DOCENTE

Lección magistral: El profesor expondrá los contenidos del curso en sesiones presenciales.

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.

Seminarios. En ellos se discutirán los resultados obtenidos en los trabajos propuestos, las dudas sobre las metodologías empleadas, y se supervisará la preparación de los informes elaborados por los estudiantes.

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

EVALUACIÓN

La nota final de la asignatura se basará en



- 60% realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura.
- 40% discusión en tutorías y/o seminarios sobre los ejercicios, trabajos o prácticas realizados en la asignatura.

REFERENCIAS

Básicas

- Juan Andrés, J, Bertran, Eds. (several authors) Theoretical and Computational Chemistry. Foundations, Methods and Techniques. Publicacions de la Universitat Jaume I. Castellon (Spain). 2007
- F. Jensen. Introduction to Computational Chemistry, 2nd Ed. .Wiley, 2007
- A. Szabo, N. Ostlund. Modern Quantum Chemistry. Macmillan. 1982
- G. C. Schatz and M. A. Ratner, editors. Quantum Mechanics in Chemistry . Dover, New York, USA, 2002
- H.-D. Meyer, F. Gatti, and G. A. Worth, editors. M C T D H: Basic Theory, Extensions, and Applications to Multidimensional Quantum Dynamics . VCH, Weinheim, Germany, 2009
- Introduction to quantum mechanics: a time-dependent perspective, by David J. Tannor. 2007. University Science Books.
- Elements of Molecular Dynamics, by W. Smith 2014