FICHA IDENTIFICATIVA

Datos de la Asignatura

Código	44975
Nombre	Métodos de la química teórica II
Ciclo	Máster
Créditos ECTS	5.0
Curso académico	2021 - 2022

Titulación(es)

Titulación	Centro	Curso	Periodo
2245 - Máster Universitario Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelizac. Comput.	Facultad de Química	1	Anual

Materias

Titulación	Materia	Carácter
2245 - Máster Universitario Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelizac. Comput.	2 - Métodos	Obligatoria

Coordinación

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

RESUMEN

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?

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

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

2245 - Máster Universitario Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelizac. Comput.

- 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 demuestra su conocimiento y comprensión de los hechos aplicando conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química Teórica y Modelización Computacional.
- El estudiante está familiarizado con los postulados fundamentales de la Mecánica Cuántica necesarios para un buen entendimiento de los métodos más comunes utilizados en química cuántica.
- 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.
- El/la estudiante es capaz de adaptarse a diferentes entornos culturales demostrando que responde al cambio con flexibilidad.

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

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 de dinámica molecular

DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS

1.

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

2.

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

3.

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

4.

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

5.

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

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

7.

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

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
TOTAL	**35,00**	

METODOLOGÍA DOCENTE

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 mediantes 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.

EVALUACIÓN

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.

Examen final 70%

Evaluación Continua 30%

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

ADENDA COVID-19

Esta adenda solo se activará si la situación sanitaria lo requiere y previo acuerdo del Consejo de Gobierno