



Asignatura: Métodos de la Química Teórica II
Código: 32528
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Master en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

1. ASIGNATURA / COURSE TITLE

Métodos de la Química Teórica II / [Theoretical Chemistry Methods II](#)

1.1. Código / Course number

32528

1.2. Materia / Content area

Módulo 2. Métodos / [Module 2. Methods](#)

1.3. Tipo / Course type

Obligatoria / [Compulsory subject](#)

1.4. Nivel / Course level

Máster / [Master](#)

1.5. Curso / Year

1º / [1st](#)

1.6. Semestre / Semester

2º / [2nd](#)

1.7. Número de créditos / Credit allotment

5 créditos ECTS / [5 ECTS credits](#)

1.8. Requisitos previos / Prerequisites

No hay requisitos previos / [There are no previous prerequisites](#)

1.9. Requisitos mínimos de asistencia a las sesiones presenciales / Minimum attendance requirement

La asistencia a las clases es obligatoria / [Attendance is mandatory](#)



Asignatura: Métodos de la Química Teórica II
Código: 32528
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Master en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

1.10. Datos del equipo docente / Faculty data

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Vicent Moliner (coordinador / [coordinator](#))
Departamento de Química Física y Analítica / [Department of Physical Chemistry and Analytical Chemistry](#)
Universitat Jaume I / [Jaume I University](#)
Teléfono / **Phone**: 964728084
Correo electrónico/**Email**: moliner@uji.es
Página web/**Website**: <http://www.biocomp.uji.es>
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: Contact by email

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Iñaki Tuñón
Departamento de Química Física / [Department of Physical Chemistry](#)
Universidad de Valencia / [University of Valencia](#)
Teléfono / **Phone**: 963544332
Correo electrónico/**Email**: ignacio.tunon@uv.es
Página web/**Website**: <http://www.uv.es/tunon/>
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: Contact by email

1.11. Objetivos del curso / Course objectives

1.11a. Resultados del 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

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?



Asignatura: Métodos de la Química Teórica II
Código: 32528
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Master en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

- ¿Cómo obtener propiedades promedio y de equilibrio en sistemas con muchas configuraciones accesibles?
- ¿Cómo se pueden calcular propiedades dependientes del tiempo?

1.11b. Competencias

Estos resultados del aprendizaje contribuyen a la adquisición de las siguientes competencias del curso:

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.



Asignatura: Métodos de la Química Teórica II
Código: 32528
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Master en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

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.

1.11a. Learning objectives

This is the second course of the Master devoted to methods of Theoretical and Computational Chemistry. In this case the focus is on methods for the study of large molecular systems with a large number of accessible conformations. Therefore, the course focuses on three main objectives:

- Calculation of the energy for large systems: force fields, and methods based on continuum models and methods based on the use of hybrid QM / MM potentials
- Exploring the configurational space: Methods of classical and quantum molecular dynamics
- Obtaining dynamic properties through molecular dynamics simulations

More specifically, the specific objectives of the course in the form of questions are:

- How can we describe large molecular systems such as proteins or nucleic acids?
- How to describe large molecular systems when a subset of atoms has to be described by quantum mechanics.
- How to describe intermolecular interactions in large systems.
- How to describe molecules in solution.
- Which are the advantages/disadvantages of continuum models?
- How to get average and equilibrium properties in systems with many configurations available.
- How can we calculate time-dependent properties.

1.11b. Skills

These learning objectives contribute to provide the following skills for the students:

BASIC AND GENERAL SKILLS

CB6 - Students possess and understand knowledge that provides a basis or opportunity to be original in the development and/or application of ideas, often in a research context.



Asignatura: Métodos de la Química Teórica II
Código: 32528
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Master en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

CB7 - Students know how to apply the acquired knowledge and their problem solving capacity in new or little known environments within broader (or multidisciplinary) contexts related to their area of study.

CB8 - Students are able to integrate knowledge and face the complexity of making judgments from information that, incomplete or limited, includes reflections on social and ethical responsibilities linked to the application of their knowledge and judgments.

CB9 - Students know how to communicate their conclusions and the knowledge and reasons that support them to specialized and non-specialized audiences in a clear and unambiguous way.

CB10 - Students possess the learning skills that allow them to continue studying in a way that will be self-directed or autonomous.

CG01 - Students are able to foster, in academic and professional contexts, technological and scientific progress within a society based on knowledge and respect for: a) fundamental rights and equal opportunities between men and women, b) The principles of equal opportunities and universal accessibility for persons with disabilities, and c) the values of a culture of peace and democratic values.

CG02 - Students are able to solve problems and make decisions of any kind under the commitment to the defense and practice of equality policies.

CROSS-COMPREHENSIVE SKILLS

CT01 - Students are able to adapt their selves to different cultural environments by demonstrating that they are able to respond to change with flexibility.

SPECIFIC SKILLS

CE01- Students demonstrate their knowledge and understanding of the facts applying concepts, principles and theories related to the Theoretical Chemistry and Computational Modeling.

CE04 - Students understand the theoretical and practical bases of computational techniques with which they can analyze the electronic, morphological and structural structure of a compound and interpret the results adequately.

CE12 - Students are familiar with the fundamental postulates of Quantum Mechanics necessary for a good understanding of the most common methods used in quantum chemistry.

CE16 - Students are able to discern between the different existing methods and know how to select the most appropriate method for each problem.



Asignatura: Métodos de la Química Teórica II
Código: 32528
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Master en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

1.12. Contenidos del programa / **Course contents**

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



Asignatura: Métodos de la Química Teórica II
Código: 32528
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Master en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

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

Práctica 6. Cálculo de efectos cinéticos isotópicos

Unit 1. Intermolecular interactions. Introduction. Long range interactions. Repulsive interactions. Total interactions: models and limitations

Unit 2. Force Fields. Introduction. Energy terms. Parametrization and force fields. Practical questions: validation

Unit 3. Simulation methods. Introduction. Definition of the system. Molecular Dynamics. Practical questions.

Unit 4. Molecular Geometry and Energy. Potential energy surface (PES). Exploration and characterization of stationary points. Molecular properties. Conformational space of biological molecules

Unit 5. Solvation Models applied to Quantum Mechanics. Discrete Models. Continuum Models. Mixed discrete-continuum Models. Hybrid QM/MM Models. Applications

Unit 6. Free Energy Calculations. Introduction. Normal Modes Analysis method. Thermodynamic properties and averaged geometries. Helmholtz and Gibbs Free Energies. Free Energies and Partition Functions. Free Energies as Ensemble Averages. The Particle Insertion Method. Free Energy Perturbation. Thermodynamic Integration. Slow Growth. Umbrella Sampling. Problems and Errors

Unit 7. Advanced Simulation methods: Introduction. Ab Initio Molecular Dynamics. Car-Parrinello Molecular Dynamics

Unit 8. Advanced Free Energy methods: physical path-based methods: nudged elastic band, dimer method, string method, growing string method, transition path sampling, Parallel Tempering and Replica Exchange MD. History-dependent biasing potential methods: Metadynamics (MTD) and Paradynamics (PD).

Laboratory:

Practical lesson 1. Calculation of force field terms using quantum mechanics

Practical lesson 2. Molecular Dynamics of aqueous solutions

Practical lesson 3. Molecular dynamics of proteins

Practical lesson 4. Reactivity: obtaining the reaction profile in gas phase.

Practical lesson 5. Reactivity: obtaining the reaction profile in solution.

Practical lesson 6. Kinetic isotope effects (KIE).



Asignatura: Métodos de la Química Teórica II
Código: 32528
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Master en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

1.13. Referencias de consulta / Course bibliography

- 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. Métodos docentes / Teaching methodology

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.

Lecture: The Professor will deliver face-to-face, or, online video lectures about the theoretical contents of the course during two-hour sessions. The presentations will be based on the different materials available at the Moodle platform.



Asignatura: Métodos de la Química Teórica II
 Código: 32528
 Centro: Facultad de Ciencias
 Titulación: Master en Química Teórica y Modelización Computacional
 Nivel: Máster
 Tipo: Formación Obligatoria
 N° de créditos: 5 ECTS

Practical sessions: Teacher will propose exercises based in theoretical concepts seen in lectures to perform calculations with computational programs.

Network teaching: All the tools available at the Moodle website (<https://posgrado.uam.es>) will be used (uploading of teaching materials, utilization of work team strategies, wiki, blogs, e-mail, etc.).

Tutoring sessions: The professor can organize either individual or group tutoring sessions about particular topics and questions raised by students.

Online Seminars: After the lecturing period, online seminars between the Professor and the students will be arranged at the *virtual classroom* in order to discuss the results being obtained, the potential problems and difficulties in using the various methodologies as well as to supervise the preparation of the required reports.

3. Tiempo de trabajo del estudiante / Student workload

Presencial:

Clases teóricas en aula / aula virtual 20 horas
 Clases prácticas/seminarios..... 15 horas

No Presencial:

Estudio autónomo individual o en grupo..... 40 horas
 Preparación de seminarios..... 20 horas
 Elaboración de una memoria con ejercicios planteados en clase..... 30 horas

TOTAL (5 ECTS * 25 horas/ECTS)..... 125 horas

Contact hours:

Theoretical lessons in classroom / virtual classroom 20 hours
 Practical lessons/seminars..... 15 hours

Independent study hours:

self-study or group study 40 hours
 Preparation of seminars, assigned tasks and study..... 20 hours
 Elaboration of a memory based on the exercises proposed in class.... 30 hours

TOTAL (5 ECTS * 25 hours/ECTS)..... 125 hours



Asignatura: Métodos de la Química Teórica II
Código: 32528
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Master en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

4. Métodos de evaluación y porcentaje en la calificación final / Evaluation procedures and weight of components in the final grade

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.

Ordinary assessment

The knowledge acquired by the student will be evaluated along the course. The educational model to follow will emphasize a continuous effort and advance in training and learning.

The final student mark will be based on exercises that must be done during the course and the discussion of them. These exercises will be based in the contents of practical lessons of the course.

Extraordinary assessment

The student will have to face a final exam, including both theory and practical exercises. The student mark will be obtained from:

- 70% from the final exam,
- 30% from the individual work.

5. Cronograma* / Course calendar

Por favor, comprobar el horario oficial publicado en la página web del Máster.
Please, check the official schedule posted on the master website.

*Este cronograma tiene carácter orientativo

*This course calendar is orientative