



Asignatura: Dinámica Química y Molecular y Simulación y Modelización por Ordenador
Código: 31237
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 9 ECTS

1. ASIGNATURA / COURSE TITLE

Dinámica Química y Molecular y Simulación y Modelización por Ordenador / [Chemistry and Molecular Dynamics - Simulation and Modelling](#)

1.1. Código / Course number

31237

1.2. Materia / Content area

Módulo 5. Modelización avanzada y aplicaciones / [Module 5. Advanced modelling and applications](#)

1.3. Tipo / Course type

Obligatoria / [Compulsory subject](#)

1.4. Nivel / Course level

Máster / [Master](#)

1.5. Curso / Year

2º / [2nd](#)

1.6. Semestre / Semester

1º / [1st](#)

1.7. Número de créditos / Credit allotment

9 créditos ECTS / [9 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: Dinámica Química y Molecular y Simulación y Modelización por Ordenador
Código: 31237
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 9 ECTS

1.10. Datos del equipo docente / Faculty data

Docente(s) / [Lecturer\(s\)](#): Cecilia Colletti
Universidad de Chieti / [University of Chieti](#)

Docente(s) / [Lecturer\(s\)](#): José M. Hermida
Universidad de Vigo / [University of Vigo](#)

Docente(s) / [Lecturer\(s\)](#): György Lendvay
[Hungarian Academic of Sciences](#)

Docente(s) / [Lecturer\(s\)](#): Pedro A. Enríquez
Universidad de La Rioja / [University of La Rioja](#)

Docente(s) / [Lecturer\(s\)](#): Fermin Huarte
Universidad de Barcelona / [University of Barcelona](#)

Docente(s) / [Lecturer\(s\)](#): Manuel Lara
Universidad Autónoma de Madrid / [Autonomous University of Madrid](#)

1.11. Objetivos del curso / Course objectives

1.11a. Resultados del aprendizaje

- 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 cuasiclásica (principios y aplicaciones)
- Descripción teórica de la transferencia colisional de energía

1.11b. Competencias

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



Asignatura: Dinámica Química y Molecular y Simulación y Modelización por Ordenador
Código: 31237
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 9 ECTS

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.

CG04 - Los estudiantes desarrollan un pensamiento y razonamiento crítico y saben comunicarlos de manera igualitaria y no sexista tanto en forma oral como escrita, en su lengua propia y en una lengua extranjera.

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.

CE18 - Conoce teorías y métodos de cálculo asociados a procesos cinéticos y evalúa críticamente su aplicabilidad al cálculo de constantes de velocidad.



Asignatura: Dinámica Química y Molecular y Simulación y Modelización por Ordenador
Código: 31237
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 9 ECTS

CE19 - El/la 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.

1.11a. Learning objectives

- To outline the basics of the time-dependent wave-packet approach, that will be exemplified through the simulation of simple wave-packet propagations in one dimension.
- To know the fundamentals of classical Molecular Dynamics and the steps to prepare MD calculations.
- Time-dependent wavepacket approach: obtaining scattering information
- To overview of the theories of reaction rates: The basic properties of elementary reactions as obtained from reaction kinetics experiments
- The quasiclassical trajectory method(Principles and Applications)
- Theoretical description of collisional energy transfer

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.

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.



Asignatura: Dinámica Química y Molecular y Simulación y Modelización por Ordenador
Código: 31237
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 9 ECTS

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.

CG04 - Students develop a critical thinking and reasoning and know how to communicate them in an egalitarian and non-sexist way both in oral and written form, in their own language and in a foreign language.

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.

CE18 - Students know theories and methods of calculation associated with kinetic processes and evaluate its applicability to the calculation of speed constants.

CE19 - Student are familiar with computational techniques which, based on mechanics and molecular dynamics, are the basis for designing molecules of interest in fields such as pharmacology, petrochemistry, etc.

1.12. Contenidos del programa / Course contents

Mixed quantum-classical methods in collisional dynamics.

Intermolecular Forces, explicit solvent models and QM/MM statistical calculations.

Reaction Rate Theory.

The QCT method. From principles and to applications in Reaction Dynamics.

Molecular Dynamics: Fundamentals and Gas Physisorption Simulations.

Time-dependent wavepacket approach: obtaining scattering information.

1.13. Referencias de consulta / Course bibliography

“Introduction to quantum mechanics: a time-dependent perspective”, by David J. Tannor. 2007. University Science Books.



Asignatura: Dinámica Química y Molecular y Simulación y Modelización por Ordenador
 Código: 31237
 Centro: Facultad de Ciencias
 Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
 Nivel: Máster
 Tipo: Formación Obligatoria
 N° de créditos: 9 ECTS

‘Elements of Molecular Dynamics’, by W. Smith 2014

2. Métodos docentes / Teaching methodology

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 (<https://posgrado.uam.es>). 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.

Lecture: The Professor will deliver lectures about the theoretical contents of the course.

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.).

Seminars: The Professor and the students will 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.

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

3. Tiempo de trabajo del estudiante / Student workload

Presencial:

Clases teóricas.....56 horas
 Seminarios.....7 horas

No Presencial:

Estudio autónomo individual o en grupo.....66 horas
 Preparación de seminarios.....36 horas
 Elaboración de una memoria con ejercicios planteados en clase.....60 horas



Asignatura: Dinámica Química y Molecular y Simulación y Modelización por Ordenador
Código: 31237
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 9 ECTS

TOTAL (9 ECTS * 25 horas/ECTS).....225 horas

Contact hours:

Theoretical lessons in classroom.....56 hours
Seminars.....7 hours

Independent study hours:

self-study or group study66 hours
Preparation of seminars, assigned tasks and study.....36 hours
Elaboration of a memory based on the exercises proposed in class.....60 hours

TOTAL (9 ECTS * 25 hours/ECTS).....225 hours

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

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.

The next criteria will be followed for assessment of student exercises:

- 60% Elaboration of a memory based on the exercises proposed in class.
- 40% Discussions between the student and professor in tutoring sessions and seminars about the exercises proposed in class.

5. Cronograma / Course calendar

La edición número 13 del Curso Intensivo del Máster en Química Teórica y Modelización Computacional tendrá lugar en la Università degli Studi di Perugia (Italia) del 3 al 28 de septiembre de 2018.

Información del curso, conferencias y horario en:
<http://www.chm.unipg.it/chimgen/mb/theo2//TCCM2018/EM-TCCM2018/EM-TCCM/Welcome.html>

The 13th edition of the Intensive Course of the Master in Theoretical Chemistry and Computational Modelling will be organized at the Università degli Studi di Perugia (Italy) from 3rd to 28th September 2018.

Curso 2018-2019



Asignatura: Dinámica Química y Molecular y Simulación y Modelización por Ordenador
Código: 31237
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 9 ECTS

Further information of the Intensive Course, lectures, schedule on:

<http://www.chm.unipg.it/chimgen/mb/theo2//TCCM2018/EM-TCCM2018/EM-TCCM/Welcome.html>