



Guía Docente:

MODELIZACIÓN MOLECULAR Y MÉTODOS DE SIMULACIÓN



FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS
UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID
CURSO 2015-2016



I.- IDENTIFICACIÓN

| | |
|---------------------------------|---|
| NOMBRE DE LA ASIGNATURA: | Modelización Molecular y Métodos de Simulación |
| NÚMERO DE CRÉDITOS: | 6 |
| CARÁCTER: | Optativa |
| MATERIA: | Química Física Avanzada |
| MÓDULO: | Avanzado |
| TITULACIÓN: | Grado en Química |
| SEMESTRE/CUATRIMESTRE: | Primero (cuarto curso) |
| DEPARTAMENTO/S: | Química Física I |

PROFESOR/ES RESPONSABLE/S:

| Grupo A | |
|---------------------|---|
| Teoría Seminario | Profesor: CARLOS VEGA DE LAS HERAS Departamento: Química Física I Despacho: QB-255 e-mail: cvega@quim.ucm.es |
| Tutoría | Profesor: LUIS GONZÁLEZ MACDOWELL Departamento: Química Física I Despacho: QB-237 e-mail: lugonzal@ucm.es |
| Laboratorio | Profesor: JOSÉ LUIS FERNÁNDEZ ABASCAL Departamento: Química Física I Despacho: QB-249; QB-255 e-mail: abascal@quim.ucm.es |

II.- OBJETIVOS

■ OBJETIVO GENERAL

En esta asignatura se pretende dar a conocer al alumno las modernas técnicas utilizadas en química computacional. En particular se pretende dar una visión de los métodos de simulación y estructura electrónica para el cálculo de propiedades electrónicas, estructurales, termodinámicas y dinámicas de diferentes sistemas, tanto compuestos por moléculas aisladas como en fase condensada. Para la modelización y simulación de moléculas y sistemas químicos se manejarán programas informáticos, tanto comerciales como de acceso libre.

■ OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Desarrollar conceptos fundamentales y avanzados de la mecánica cuántica a través de sus aplicaciones.
- Introducir al alumno en la utilización práctica de los métodos aproximados que se utilizan en el cálculo de la estructura electrónica de las moléculas.



- Utilizar software de modelización molecular para optimizar geometrías y obtener propiedades moleculares y espectros vibracionales, electrónicos y de resonancia magnética nuclear.
- Desarrollar conceptos de termodinámica estadística a través de sus aplicaciones a diferentes sistemas moleculares y fases condensadas.
- Conocer el fundamento de los métodos de simulación por Monte Carlo y dinámica molecular.
- Utilizar software de modelización molecular para calcular propiedades termodinámicas, estructurales y dinámicas de sistemas moleculares y otros en fase condensada.

III.- CONOCIMIENTOS PREVIOS Y RECOMENDACIONES

■ CONOCIMIENTOS PREVIOS:

Conocimientos básicos de Química Cuántica y Termodinámica Estadística, adquiridos en el Módulo Fundamental del Grado en Química, o contenidos equivalentes de otras titulaciones.

■ RECOMENDACIONES:

Se recomienda haber superado las asignaturas del Módulo Básico, así como la *Química Física I* y *Química Física II* del Módulo Fundamental del Grado en Química, o contenidos equivalentes en otras titulaciones.

IV.- CONTENIDOS

■ BREVE DESCRIPCIÓN DE LOS CONTENIDOS:

Cálculo de la estructura electrónica. Métodos ab initio, semiempíricos y de funcional de densidad (DFT). Aplicaciones prácticas de los cálculos cuánticos. Moléculas y sólidos. Estructura, reactividad, propiedades termodinámicas y cinéticas. Fuerzas intermoleculares. Campos de fuerza. Mecánica molecular. Dinámica molecular. Métodos de Monte Carlo. Aplicaciones de la simulación molecular a la materia condensada: sólidos, líquidos y sistemas biológicos.

■ PROGRAMA:

TEMA I. Estructura electrónica

Lección 1: Ecuación de Schrödinger para moléculas

Hamiltoniano molecular. Separación Born-Oppenheimer y Hamiltoniano electrónico. Aproximación orbital de la función de onda electrónica.

Lección 2: Ecuaciones de Hartree-Fock-Roothaan

Método variacional. Determinante de Slater. Método del campo autoconsistente. Hartree-Fock restringido y no restringido. El problema de la contaminación de espín. Combinación lineal de orbitales atómicos y ecuaciones de Roothaan.



Lección 3: Métodos semiempíricos

Método de Hückel extendido. Métodos CNDO, INDO y NDDO. Métodos MINDO, MNDO, AM1 y PM3. Ventajas y desventajas de los métodos semiempíricos.

Lección 4: Conjuntos de bases. Optimización de geometría

Orbitales tipo Slater (STO). Orbitales tipo Gaussiano (GTO). Base mínima. Bases de valencia desdoblada. Funciones de polarización y difusas. Conjuntos de bases contraídas. Cálculo en un solo punto. Optimización de geometría.

Lección 5: Análisis de la función de onda

Análisis de poblaciones en términos del conjunto de bases. Análisis de poblaciones basado en el potencial electrostático. Análisis de poblaciones basado en la función de onda. Método de átomos en moléculas.

Lección 6: Métodos de correlación electrónica

Interacción de configuraciones (CI). Métodos CI truncados. Teoría de perturbaciones Moller-Plesset (MP).

Lección 7: Funcionales de densidad (DFT)

Funcionales, derivadas funcionales. Teorema de Hohenberg-Kohn. Ecuaciones de Kohn y Sham. Aproximaciones de densidad local. Aproximaciones de gradiente generalizado. Funcionales de intercambio y correlación. Funcionales híbridos. Ventajas e inconvenientes de los métodos DFT. Cálculos cuánticos en sólidos.

Lección 8: Cálculo de propiedades I

Propiedades eléctricas y magnéticas: momento dipolar eléctrico y magnético, polarizabilidad. Propiedades espectroscópicas: frecuencias vibracionales, intensidades de absorción en infrarrojo, intensidades Raman. Apantallamiento magnético nuclear.

Lección 9: Cálculo de propiedades II

Curvas de energía potencial. Propiedades termodinámicas. Estabilidad relativa de isómeros. Análisis conformacional.

Lección 10: Aplicaciones a la reactividad química.

Perfil de reacción y superficie de energía potencial. Determinación de coeficientes cinéticos. Procesos no adiabáticos. Teoría del estado de transición.

Lección 11: Interacciones moleculares

Ecuación de Schrödinger y fuerzas intermoleculares. Desarrollo multipolar. Campos de fuerza. Tipos de átomos. Energías de tensión, flexión y torsión de enlaces.

***Tutoría 1:** Resumen de los elementos básicos de la Mecánica Cuántica: operadores, partícula en la caja, rotor rígido, oscilador armónico, átomo de hidrógeno. Orbitales atómicos. Determinantes de Slater.*

***Tutoría 2:** Matemáticas para química computacional. Sistemas de ecuaciones homogéneos. Autovalores y autovectores de una matriz. Diagonalización. Método de los multiplicadores de Lagrange. Breve introducción a las transformadas de Fourier.*

Práctica 1:

Ficheros de entrada en Gamess: el formato de la matriz Z y el formato de coordenadas cartesianas. Entrada de datos en el programa Gamess. El programa VMD. Análisis de



los ficheros de salida: energía cinética y potencial, matriz C, convergencia del cálculo RHF, cargas parciales, órdenes de enlace, simetría de los OM y de los estados electrónicos. Manejo del programa de ayuda de Gamess wxmacmolplt. Visualización de OM. Cálculos ab-initio y semi-empíricos para moléculas sencillas: HNO₃, H₂O. Determinación de la densidad electrónica total y del potencial electrostático para las moléculas de ciclohexeno, agua, benceno y serotonina.

Práctica 2:

Bases de Dunning: doble, triple y cuádruple Z. Variación de la energía con la elección de la base. Variación de la energía del HF en función de la distancia internuclear. Optimización de geometrías. Optimización de energías para el agua. Modos normales de vibración. Espectro IR y Raman del agua. Cálculos en Gamess congelando grados de libertad: cálculo de barreras torsionales.

Práctica 3:

Cálculo del espectro visible del agua mediante cálculos de tipo CIS. Intensidad de los tránsitos. Cálculo de la energía de correlación del agua y del HCl mediante cálculos CISD y MP2. Cálculos con agregados: el dímero del agua mediante cálculos de tipo RHF, MP2 y DFT. Comparación entre los tiempos de cálculo. Optimización de geometrías para la molécula de formaldehído en su estado electrónico fundamental y en su primer estado excitado singlete. Cálculo CIS con geometría del estado electrónico del estado fundamental. Transiciones Franck-Condon.

Práctica 4:

Cálculo de propiedades termodinámicas. Funciones de partición translacional, rotacional, vibracional y electrónica. Cálculo de la constante de equilibrio para la reacción de formación del agua a partir de sus elementos. Mecanismos de reacción. Estudio de la reacción O₃ + Cl. Cálculo del estado de transición y del perfil de reacción. Análisis de la superficie de energía potencial. Cálculo de la constante cinética.

TEMA II. Simulación molecular

Lección 12: Mecánica molecular

Campos de fuerza usados en líquidos y sistemas biológicos. Mecánica Molecular. Minimización de energía: método del gradiente conjugado. Potenciales de dos y tres cuerpos: la aproximación de potencial par aditivo.

Lección 13: Termodinámica estadística y métodos de simulación

Principios de mecánica Estadística. Ergodicidad. Factor de Boltzmann e integral de configuración. Muestreo del sistema.

Lección 14: Principios básicos de la simulación

Condiciones de contorno periódicas. Fuerzas de corto alcance. Truncamiento del potencial y lista de vecinos. Generación de la configuración inicial. Fase de equilibrado.

Lección 15: Dinámica molecular I

Ecuaciones del movimiento para sistemas atómicos. Algoritmos de integración: Verlet y *leap-frog*. Paso de tiempo y conservación de la energía.



Lección 16: Cálculo de propiedades I

Cálculo de propiedades estáticas. Funciones de distribución. Factor de estructura. Presión. Fluctuaciones: capacidad calorífica, compresibilidad isoterma. Correcciones de largo alcance a la energía interna y a la presión.

Lección 17: Cálculo de propiedades II

Funciones de autocorrelación. Cálculo de propiedades dinámicas: coeficiente de difusión, viscosidad, y conductividad térmica.

Lección 18: Fuerzas de largo alcance

Sumas de Ewald: suma y truncamiento en espacio real y espacio recíproco. Implementación PME. Cálculo de la constante dieléctrica.

Lección 19: Dinámica molecular II

Formulación Lagrangiana de la dinámica. Termostatos: Berendsen, Nosé-Hoover y reescalado estocástico. Barostatos: Berendsen y Parrinello-Rahman. Ligaduras sobre distancias y ángulos de enlace: método shake.

Lección 20: Métodos de Monte Carlo

Números aleatorios. Métodos de muestreo. Muestreo de importancia. Método de Metrópolis. Simulaciones NVT. Simulaciones NpT. Monte Carlo de moléculas flexibles. Análisis conformacional. Simulación por MC de polímeros y biopolímeros.

Lección 21: Cálculos de energías libres. Equilibrio de fases.

Determinación del potencial químico en simulación: métodos de Widom, integración termodinámica, perturbativo (FEP) y del cristal de Einstein. Equilibrio de fases mediante cálculo de potenciales químicos. Equilibrio de fases mediante coexistencia directa. Cálculo de la tensión superficial. Integración Gibbs Duhem.

Lección 22: Sistemas de interés biológico

El problema del plegamiento de proteínas. Reconocimiento molecular y diseño de fármacos: QSAR.

Tutoría 3: Elementos básicos de Mecánica Estadística. Función de partición del gas ideal, integral configuracional. Colectivos.

Práctica 5:

El programa Gromacs de dinámica molecular. Manejo de ficheros de entrada, salida y visualización de resultados. Aspectos prácticos de la dinámica molecular: elección de los parámetros de la simulación, paso de tiempo, truncamiento del potencial, elección del campo de fuerzas dimensiones del sistema simulado, geometría de las condiciones periódicas.

Práctica 6:

Termostatos y barostatos Análisis de trayectorias. Cálculos de propiedades termodinámicas, estructurales. Cálculo de propiedades dinámicas: funciones de autocorrelación y propiedades de transporte.. Aplicaciones a líquidos y sólidos.

Práctica 7:

Equilibrio de fases. Método de coexistencia directa. Determinación de la presión de vapor de un líquido y de su tensión superficial. Coexistencia directa líquido-sólido. Integración termodinámica. Integración Gibbs-Duhem.



Práctica 8:

Simulación de moléculas orgánicas y biopolímeros. Ficheros de tipo PDB.

Estudio mediante dinámica molecular de un polipéptido.

V.- COMPETENCIAS

■ GENERALES:

Las competencias generales del Módulo Avanzado de aplicación en esta asignatura son:

- **CG1-MA1:** Reconocer y valorar los procesos químicos en la vida diaria.
- **CG2-MA1:** Valorar la importancia de la Química y su impacto en la sociedad industrial y tecnológica.
- **CG2-MA2:** Relacionar áreas interdisciplinares en plena expansión, y tomar conciencia de la importancia que la investigación interdisciplinar tiene en el avance de la Ciencia.
- **CG3-MA1:** Demostrar una base de conocimientos y habilidades con las que pueda continuar sus estudios en áreas especializadas de Química o en áreas multidisciplinares.
- **CG4-MA1:** Plasmear los conocimientos específicos de cada materia en el lenguaje científico universal, entendido y compartido interdisciplinariamente.
- **CG7-MA1:** Aplicar conocimientos teóricos y prácticos a la solución de problemas en Química y seleccionar el método más adecuado para resolverlos.
- **CG8-MA1:** Valorar investigaciones y estudios detallados en el campo de la Química.

■ ESPECÍFICAS:

Las competencias específicas de la Materia Química Física Avanzada que son de aplicación en esta asignatura son las siguientes:

- **CE11-MAQF1:** Obtener por simulación propiedades estructurales, termodinámicas y dinámicas de diferentes sistemas, tanto compuestos por moléculas aisladas como en fase condensada.
- **CE12-MAQF1:** Aplicar las técnicas actuales que se utilizan para la simulación en ordenador de sistemas moleculares.
- **CE12-MAQF2:** Manejar programas informáticos tanto comerciales como de acceso libre para la modelización y simulación de moléculas y sistemas químicos.

■ TRANSVERSALES:

Las competencias transversales del Módulo Avanzado que son de aplicación en esta asignatura son:



- **CT1-MA1:** Elaborar y escribir memorias e informes de carácter científico y técnico.
- **CT2-MA1:** Trabajar en equipo.
- **CT3-MA1:** Aprender a tomar decisiones ante un problema real práctico.
- **CT4-MA1:** Seleccionar el método más adecuado para resolver un problema planteado.
- **CT5-MA1:** Consultar, utilizar y analizar cualquier fuente bibliográfica.
- **CT5-MA2:** Manejar bibliografía y bases de datos especializadas, y de recursos accesibles a través de Internet.
- **CT7-MA1:** Usar programas informáticos que sirvan, en el mundo de la Química, para calcular, diseñar, simular, aproximar y predecir.
- **CT8-MA1:** Comunicarse en español utilizando los medios audiovisuales más habituales.
- **CT11-MA1:** Desarrollar trabajo autónomo.

VI. – RESULTADOS DEL APRENDIZAJE

Una vez superada esta asignatura el alumno deberá ser capaz de:

Lección 1

1. Escribir el Hamiltoniano de una molécula incluyendo los términos correspondientes al movimiento nuclear y al movimiento electrónico.
2. Resolver la ecuación de Schrodinger para una configuración nuclear fija.
3. Obtener la superficie de energía potencial.

Lección 2

4. Demostrar el teorema variacional.
5. Escribir un determinante de Slater para un sistema polieletrónico.
6. Demostrar que el determinante de Slater es antisimétrico respecto al intercambio de electrones.
7. Determinar la energía de un determinante de Slater.
8. Escribir un determinante de Slater utilizando como orbitales moleculares una combinación lineal de orbitales atómicos.
9. Deducir las ecuaciones de Hartree-Fock y las ecuaciones de Roothaan.
10. Explicar el método de auto-consistencia en la resolución de las ecuaciones de Roothaan.

Lección 3

11. Simplificar integrales bielectrónicas utilizando las aproximaciones CNDO y NDDO.
12. Explicar qué integrales se toman como parámetros ajustables en un cálculo semi-empírico.
13. Explicar las ventajas e inconvenientes de los métodos semi-empíricos.

Lección 4

14. Identificar las diferencias existentes entre un orbital atómico hidrogenoide, un orbital atómico de Slater y un orbital Gausiano.
15. Determinar rápidamente cuantos orbitales atómicos se utilizan en un cálculo de base mínima.



16. Incluir orbitales atómicos adicionales a los de base mínima en un cálculo de estructura electrónica: duplicación de orbitales e inclusión de orbitales atómicos vacíos (polarización).
17. Determinar los puntos estacionarios de una función de muchas variables: Optimización de geometría. Establecer las diferencias entre un mínimo y un punto de silla en una función de muchas variables.

Lección 5

18. Obtener a partir de la matriz de coeficientes C de la resolución de las ecuaciones de Roothaan las cargas parciales atómicas y los órdenes de enlace.
19. Explicar los métodos de obtención de cargas parciales basados en el potencial electrostático.

Lección 6

20. Describir el problema de la correlación electrónica.
21. Incorporar configuraciones electrónicas excitadas en la descripción de la función de onda del estado fundamental.
22. Explicar qué métodos se encuentran disponibles para la obtención de la energía en estados excitados.
23. Deducir las ecuaciones del método de perturbaciones en mecánica cuántica y aplicarlas para la obtención de la energía de correlación electrónica (MP2).

Lección 7

24. Identificar las diferencias entre función y funcional.
25. Demostrar el teorema de Hohenberg-Kohn.
26. Escribir la energía de un sistema como un funcional de la densidad.
27. Describir las aproximaciones locales y de gradiente generalizado en la formulación de funcionales aproximados.

Lección 8

28. Escribir las expresiones matemáticas que permiten determinar los momentos dipolares eléctricos y magnéticos una vez conocida la función de onda del sistema.
29. Escribir las expresiones matemáticas que permiten determinar a partir de cálculos de estructura electrónica la polarizabilidad y las intensidades de absorción en diferentes espectroscopías.
30. Obtener las frecuencias y modos normales de vibración utilizando cálculo matricial.

Lección 9

31. Obtener curvas de energía potencial para moléculas en función de ángulos torsionales.
32. Determinar las propiedades termodinámicas de un gas ideal (U,H,S,G) a partir de la función de partición utilizando la información suministrada por un cálculo cuántico.

Lección 10

33. Aplicar la teoría del estado de transición para determinar la constante cinética de una reacción química a partir de la superficie de energía potencial.

Lección 11

34. Aplicar la ecuación de Schrodinger en agregados moleculares.
35. Determinar la energía intermolecular de un agregado molecular.
36. Descomponer la energía de un sistema como suma de términos intramoleculares (tensión, flexión, torsión) e intermoleculares (multipolares y van der Waals).



Lección 12

37. Describir los campos de fuerzas más utilizados en simulación molecular.
38. Escribir la energía intermolecular de un sistema como suma de potenciales de dos y tres cuerpos.
39. Buscar los mínimos de una función de muchas variables utilizando el método de los gradientes conjugados.

Lección 13

40. Escribir la energía libre de un sistema en términos de la función de partición del gas ideal y de la integral configuracional.

Lección 14

41. Definir las condiciones de contorno periódicas.
42. Establecer la distancia adecuada para truncar el potencial intermolecular.
43. Utilizar listas de vecinos para reducir el tiempo de cálculo.
44. Determinar algebraicamente las correcciones de largo alcance a la energía potencial y a la presión para un potencial de Lennard-Jones.

Lección 15

45. Escribir las ecuaciones de Newton del movimiento y describir los algoritmos de leap-frog y de Verlet para su resolución numérica.
46. Elegir un paso de tiempo adecuado en dinámica molecular y conocer el comportamiento de las energías cinética, potencial y total en una simulación dentro del colectivo NVE.

Lección 16

47. Describir conceptualmente el significado de la función radial y escribir la fórmula que conduce a su determinación numérica.
48. Determinar el factor de estructura a partir de los resultados de una simulación y comparar con los resultados experimentales.
49. Determinar la energía interna, presión, capacidad calorífica y compresibilidad isoterma a partir de las trayectorias generadas por dinámica molecular.

Lección 17

50. Describir las expresiones de Einstein y de Green-Kubo para la determinación de propiedades de transporte.
51. Determinar el coeficiente de difusión, la viscosidad y la conductividad térmica a partir de los resultados de una trayectoria determinada mediante dinámica molecular.

Lección 18

52. Descomponer la energía coulombica de un sistema en tres términos: energía en espacio real, energía en espacio recíproco, y energía de auto-interacción (Sumas de Ewald).
53. Determinar la constante de Madelung para un cristal iónico.
54. Determinar la constante dieléctrica a partir de los resultados de una simulación.

Lección 19

55. Modificar las ecuaciones de Newton para simular mediante dinámica molecular un sistema a temperatura constante.
56. Modificar las ecuaciones de Newton para simular mediante dinámica molecular un sistema a presión constante.



57. Imponer ligaduras en la dinámica que permitan mantener las distancias de enlace y/o ángulos de enlace constantes en una dinámica molecular.

Lección 20

58. Obtener integrales numéricas mediante el método de Monte Carlo.

59. Obtener integrales numéricas mediante el método de Monte Carlo con el algoritmo de Metropolis.

60. Escribir el principio de reversibilidad microscópica y utilizarlo para obtener los criterios de aceptación en una simulación de Monte Carlo en los colectivos NVT y NpT.

61. Utilizar algoritmos especiales que permitan el muestreo de los grados internos de libertad: configurational bias.

Lección 21

62. Describir las ecuaciones de equilibrio entre dos fases.

63. Utilizar el método del test de Widom para determinar el potencial químico de una fase fluida.

64. Utilizar el método del cristal de Einstein para determinar el potencial químico de un sólido.

65. Describir la técnica de coexistencia directa de fases.

66. Calcular la tensión superficial a partir de las trayectorias obtenidas en una simulación.

67. Integrar la ecuación de Clapeyron de manera numérica para obtener curvas de coexistencia mediante simulación molecular.

Lección 22

68. Generar una configuración inicial para la simulación de una proteína utilizando un programa de dinámica molecular.

69. Utilizar el Protein Data Bank.

70. Describir la técnica de regresión QSAR.

VII. – HORAS DE TRABAJO Y DISTRIBUCIÓN POR ACTIVIDAD

| Actividad | Presencial (horas) | Trabajo autónomo (horas) | Créditos |
|------------------------------------|--------------------|--------------------------|----------|
| Clases teóricas | 30 | 45 | 3,0 |
| Seminarios | 5 | 7,5 | 0,5 |
| Tutorías / Trabajos dirigidos | 3 | 4,5 | 0,3 |
| Prácticas de laboratorio | 24 | 18 | 1,68 |
| Preparación de trabajos y exámenes | 6 | 7 | 0,52 |
| Total | 68 | 82 | 6 |



VIII.- METODOLOGÍA

Los contenidos de la asignatura se presentan a los alumnos en clases presenciales, divididas en dos tipos:

Las denominadas **clases presenciales de teoría** (3,0 créditos) se impartirán al grupo completo y en ellas se darán a conocer al alumno los contenidos fundamentales de la asignatura. Al comienzo de cada tema se expondrán claramente el programa y los objetivos principales del mismo. Al final del tema se hará un breve resumen de los conceptos más relevantes y se plantearán nuevos objetivos que permitirán interrelacionar contenidos ya estudiados con los del resto de la asignatura y con otras asignaturas afines. Durante la exposición de contenidos se propondrán problemas que ejemplifiquen los conceptos desarrollados o que sirvan de introducción a nuevos contenidos. Para facilitar la labor de seguimiento por parte del alumno de las clases presenciales se le proporcionará el material docente necesario, bien en fotocopia o en el Campus Virtual.

En las **clases presenciales de seminarios** (0,5 créditos) se resolverán ejercicios y cuestiones relacionados con los contenidos desarrollados en las clases de teoría. Periódicamente se suministrará al alumno una relación de dichos problemas/ejercicios con el objetivo de que intente su resolución previa a las clases, lo que incluirá en algunos casos la consulta de bibliografía. En las clases presenciales de seminarios se seguirán diferentes metodologías: resolución completa de algunos de estos ejercicios y cuestiones seleccionados, discusión crítica de los resultados obtenidos por los alumnos. En cualquier caso se debatirá el procedimiento seguido, el resultado obtenido y su significado. Por último, algunos ejercicios serán recogidos por el profesor para su evaluación. Estas clases de teoría y seminario y el trabajo que conllevan desarrollan las competencias generales CG2-MA1, CG2-MA2, CG3-MA1, CG4-MA1, CG7-MA1 y CG8-MA1 y las transversales CT1-MA1, CT2-MA1, CT3-MA1, CT4-MA1, CT5-MA1 y CT7-MA1.

Durante el desarrollo del temario, tanto en las clases presenciales de teoría como en las de seminarios, el alumno adquirirá los conocimientos y la experiencia necesarios para satisfacer todas las competencias específicas a cubrir, CE11-MAQF1, CE12-MAQF1, CE12-MAQF2 y la transversal CT11-MA1. Además, durante el desarrollo de las sesiones se hará especial énfasis en relacionar los aspectos estudiados con otras disciplinas y fenómenos químicos en la vida diaria, así como en su carácter multidisciplinar, lo que satisfará las competencias generales CG1-MA1, CG2-MA1, CG3-MA1, y CG4-MA1, y las transversales CT8-MA1 y CT12-MA1.

Se realizarán **tutorías dirigidas** (0,3 créditos) tanto sobre temas directamente relacionados con los contenidos teóricos, para ampliar conocimientos y desarrollar habilidades, como sobre temas más transversales que permitan interrelacionar los contenidos de la asignatura con otros aspectos de interés. Como complemento al trabajo personal realizado por el alumno y para potenciar el desarrollo del trabajo en grupo, se propondrá la **elaboración y presentación de un trabajo**. Todo ello permitirá que el alumno ponga en práctica sus habilidades en la obtención de información, desarrollando habilidades relacionadas con la utilización crítica de información bibliográfica y bases de datos y el trabajo en equipo (CT1-MA1, CT5-MA1, CT5-MA2). Además, cada grupo de trabajo podrá evaluar, de forma anónima, el tema desarrollado por otro grupo, de manera análoga a la revisión entre pares propia de las publicaciones científicas, lo que desarrollará el sentido crítico y autocrítico. Este proceso deberá llevarse a cabo de manera previa a la exposición de cada uno de los grupos, de modo que los alumnos implicados introduzcan las correcciones



pertinentes en la versión final del trabajo. El proceso de evaluación servirá para que los alumnos desarrollen capacidades de análisis crítico de trabajos científicos y sean capaces de corregir en sus propias elaboraciones los defectos que encuentren en los trabajos que evalúen.

El profesor programará **tutorías** con grupos reducidos de alumnos sobre cuestiones planteadas por el profesor o por los mismos alumnos. También estarán disponibles tutorías para alumnos que de manera individual deseen resolver las dudas que surjan durante el estudio. Estas tutorías se realizarán de forma presencial en los horarios indicados por cada profesor o, excepcionalmente, de modo virtual.

Se utilizará el Campus Virtual para permitir una comunicación fluida entre profesores y alumnos y como instrumento para poner a disposición de los alumnos el material que se utilizará en las clases tanto teóricas como de problemas. También podrá utilizarse como foro en el que se presenten algunos temas complementarios cuyo contenido, aunque importante en el conjunto de la materia, no se considere necesario presentarlo en las clases presenciales. Por último, esta herramienta permitirá realizar ejercicios de autoevaluación mediante pruebas objetivas de respuesta múltiple de corrección automática, que permiten mostrar tanto al profesor como al alumno qué conceptos necesitan de un mayor trabajo para su aprendizaje.

Se realizará un **laboratorio** (1,7 créditos) durante todo el curso con temáticas directamente relacionadas con los contenidos de la asignatura. Este laboratorio constará de prácticas de cálculo y de utilización de herramientas teóricas, y constituye una parte fundamental de esta asignatura. En las sesiones de laboratorio se desarrollarán las competencias específicas CE11-MAQF1, CE12-MAQF1, y CE12-MAQF2. En algunas prácticas se plantearán problemas que requieran las utilizaciones simultáneas de los conocimientos teóricos adquiridos y las herramientas de modelización y de cálculo disponibles en el laboratorio (o el aula de informática). Finalmente, el alumno presentará informes científicos individuales y en grupo de algunas de las prácticas realizadas (CT1-MA1, CT2-MA2, CT5-MA1, CT5-MA2, CT7-MA1, CT8-MA1).

IX.- BIBLIOGRAFÍA

■ BÁSICA:

- Jensen, F., *“Introduction to Computational Chemistry”*, John Wiley & Sons, 2004.
- Frenkel, D. y Smit, B., *“Understanding molecular simulation: from algorithms to applications”*, 2ª Ed., Academic Press, 2002.

■ COMPLEMENTARIA:

- Leach, A.R., *“Molecular modelling: principles and applications”*, Prentice Hall, 2001.
- Bertrán Rusca J. y Núñez Delgado, J. (coord.), *“Química Física”*, Ariel Ciencia, 2002
- Engel, T. y Reid, P., *“Quantum Chemistry and Spectroscopy”*, Prentice Hall, 2006.
- Levine, I., *“Quantum Chemistry”*, 5ª Ed., Prentice Hall, 2000.



- Foresman, J.B. y Frisch, A., “*Exploring chemistry with electronic structure methods*”, 2ª Ed., Gaussian, 1996.
- Allen, M.P. y Tildesley, D.J., “*Computer simulation of liquids*”, Oxford Univ. Press, 1987.
- Rapaport, D.C., “*The art of molecular dynamics simulation*”, 2ª Ed., Cambridge University Press, 2004.
- van der Spoel, D. y otros, “*GROMACS user manual v4.0*”, www.gromacs.org

X.- EVALUACIÓN

El rendimiento académico del alumno y la calificación final de la asignatura se computarán de forma ponderada atendiendo a los siguientes porcentajes, que se mantendrán en todas las convocatorias:

■ EXÁMENES ESCRITOS: 60%

Convocatoria de febrero: se realizará un examen final. El examen constará de preguntas y problemas sobre los contenidos impartidos durante el curso, tanto en las clases teóricas y seminarios como tutorías dirigidas y laboratorios. En la convocatoria de septiembre se realizará un único examen final semejante al realizado en la convocatoria de febrero.

Competencias evaluadas: CG1-MA1, CG2-MA1, CG2-MA1, CG2-MA2, CG3-MA1, CG4-MA1, CG7-MA1, CG8-MA1, CT1-MA1, CT2-MA1, CT3-MA1, CT4-MA1, CT5-MA1, CT7-MA1, CT8-MA1, CT12-MA1, CE11-MAQF2, CE11-MAQF3, CE12-MAQF2, CE13-MAQF1, CE13-MAQF2, CE13-MAQF3.

■ TRABAJO PERSONAL: 10%

La evaluación del trabajo de aprendizaje individual realizado por el alumno se llevará a cabo teniendo en cuenta los siguientes factores:

- Destreza del alumno en la resolución de los problemas y ejercicios propuestos, que se recogerán periódicamente en las clases presenciales.
- Valoración del trabajo realizado durante las tutorías en grupo programadas, de asistencia obligatoria, y a las cuales serán citados los alumnos periódicamente a lo largo del curso.
- Valoración de los trabajos propuestos en las tutorías programadas y realizados individualmente o en grupo por los alumnos.

La calificación obtenida por el alumno en junio por este concepto se mantendrá en la convocatoria de septiembre.

Competencias evaluadas: CG1-MA1, CG2-MA1, CG2-MA1, CG2-MA2, CG3-MA1, CG4-MA1, CG7-MA1, CG8-MA1, CT1-MA1, CT2-MA1, CT3-MA1, CT4-MA1, CT5-MA1, CT7-MA1, CT8-MA1, CT12-MA1, CE11-MAQF2, CE11-MAQF3, CE12-MAQF2, CE13-MAQF1, CE13-MAQF2, CE13-MAQF3.

■ LABORATORIO: 30%

Los alumnos desarrollarán en grupos reducidos a lo largo del curso una serie de prácticas de laboratorio, tanto de cálculo como de utilización de herramientas teóricas,



siendo la asistencia a estas prácticas **obligatoria**. Se valorará la obtención por el alumno de habilidades teórico-prácticas y la destreza en el manejo de paquetes informáticos de tratamiento de datos y modelización molecular. Para algunas de las prácticas los alumnos deberán realizar un informe científico, individualmente o en grupo, que será objeto de evaluación. En cualquier caso, la nota mínima en el laboratorio para aprobar la asignatura es de 4 sobre 10.

La calificación obtenida por el alumno en junio por este concepto se mantendrá en la convocatoria de septiembre si el alumno ha obtenido una nota superior a la mínima. En caso contrario deberá realizar un examen de laboratorio en septiembre.

Competencias evaluadas: CE11-MAQF1, CE11-MAQF2, CE11-MAQF3, CE12-MAQF2, CE13-MAQF1, CE13-MAQF2, CE13-MAQF3, CT1-MA1, CT2-MA2, CT3-MA3, CT5-MA1, CT7-MA1.

■ ASISTENCIA Y PARTICIPACIÓN ACTIVA EN LAS CLASES:

La asistencia a todas las actividades presenciales es **obligatoria**, y la participación activa del alumno en todas las actividades docentes se valorará positivamente en la calificación final.



PLANIFICACIÓN DE ACTIVIDADES – CRONOGRAMA

| TEMA | ACTIVIDAD | HORAS | GRUPOS | INICIO | FIN |
|---------------------------|--------------------|-------|--------|-----------|------------|
| I. Estructura electrónica | Clases Teoría | 15 | 1 | 1ª Semana | 8ª Semana |
| | Clases Problemas | 2,5 | 1 | | |
| | Tutoría programada | 2 | 1 | | |
| | Laboratorio | 12 | 1 | | |
| II. Simulación molecular | Clases Teoría | 15 | 1 | 8ª Semana | 15ª Semana |
| | Clases Problemas | 2,5 | 1 | | |
| | Tutoría programada | 1 | 1 | | |
| | Laboratorio | 12 | 1 | | |



RESUMEN DE LAS ACTIVIDADES

| Actividad docente | Competencias asociadas | Actividad Profesor | Actividad alumno | Procedimiento de evaluación | P | NP | Total | C |
|--------------------|--|--|--|---|----|-----|-------|-----|
| Clases de teoría | CG9-MF1, CG10-MF1, CG10-MF2, CG11-MF2, CG12-MF1, CG13-MF1, CT1-MF1, CT2-MF2, CT3-MF3, CT5-MF1, CT7-MF1, CE11-MFQF1, CE11-MFQF3, CE13-MFQF1, CE13-MFQF2 | Exposición de conceptos teóricos y planteamiento de cuestiones y nuevos objetivos. | Toma de apuntes. Resolución de cuestiones. Desarrollo de los nuevos objetivos. Formulación de preguntas y dudas. | Calificación de las respuestas realizadas a preguntas relacionadas con los conceptos teóricos. | 30 | 45 | 75 | 10% |
| Seminarios | | Aplicación de la teoría a la resolución de ejercicios numéricos y problemas. Planteamiento de nuevas cuestiones. | Resolución de los ejercicios numéricos, problemas y cuestiones. Formulación de preguntas y dudas. | Calificación de las respuestas (planteamiento y resultado) realizadas para la resolución de ejercicios numéricos y problemas. | 5 | 7,5 | 12,5 | |
| Tutorías | | Dirección y supervisión del estudio y actividades del alumno. Planteamiento de cuestiones. Resolución de dudas. | Consulta al profesor sobre las dificultades conceptuales y metodológicas que encuentra al estudiar la materia. Planteamiento de cuestiones y respuesta a las propuestas por el profesor. | No evaluable | | | | |
| Tutorías dirigidas | | Propuesta y valoración crítica de trabajos. Exposición y planteamiento de nuevos objetivos | Cooperación con los compañeros en la elaboración de trabajos. Análisis crítico de los trabajos de otros grupos. Presentación oral del trabajo corregido. Formulación de preguntas y dudas. | Valoración del trabajo, de los análisis realizados y de la presentación. | 3 | 4,5 | 7,5 | |



| Actividad docente | Competencias asociadas | Actividad Profesor | Actividad alumno | Procedimiento de evaluación | P | NP | Total | C |
|--------------------|--|---|--|--|----|----|-------|-----|
| Laboratorio | CG9-MF1, CG10-MF1, CG10-MF2, CG11-MF2, CG12-MF1, CG13-MF1, CT1-MF1, CT2-MF2, CT3-MF3, CT5-MF1, CT7-MF1, CE11-MFQF1, CE11-MFQF3, CE13-MFQF1, CE13-MFQF2 | <p>Aplicación de los contenidos teóricos a problemas prácticos.</p> <p>Descripción de las herramientas de modelización molecular.</p> | <p>Preparación, realización y estudio de los contenidos propuestos.</p> <p>Elaboración de una memoria de las prácticas realizadas.</p> | <p>Valoración del trabajo realizado y de los resultados obtenidos.</p> <p>Valoración de la memoria de prácticas presentada.</p> <p>Valoración de las habilidades y conocimientos adquiridos.</p> | 24 | 18 | 42 | 30% |
| Exámenes | | <p>Propuesta, vigilancia y corrección del examen.</p> <p>Calificación del alumno.</p> | Preparación y realización. | Corrección y valoración de los exámenes. | 6 | 7 | 13 | 60% |

P : Presenciales; NP: no presenciales (trabajo autónomo); C: calificación