

# Simulación molecular

**MÁSTER UNIVERSITARIO EN ALTA ESPECIALIZACIÓN EN  
PLÁSTICOS Y CAUCHO**

***UNIVERSIDAD INTERNACIONAL MENÉNDEZ PELAYO***

Este documento puede utilizarse como documentación de referencia de esta asignatura para la solicitud de reconocimiento de créditos en otros estudios. Para su plena validez debe estar sellado por la Secretaría de Estudiantes UIMP.



## DATOS GENERALES

### Breve descripción

En esta asignatura se incidirá en la influencia que los métodos de simulación van a tener, en un futuro muy cercano, en la manera de abordar la investigación y en cómo van a permitir predecir el comportamiento de los materiales poliméricos antes de su obtención, con el consiguiente ahorro de tiempo y dinero en el diseño de estos materiales.

El objetivo final es que el alumno sea capaz de abordar, mediante estas técnicas la resolución de problemas reales que se le presenten en el desarrollo de su trabajo.

### Título asignatura

Simulación molecular

### Código asignatura

100507

### Curso académico

2023-24

### Planes donde se imparte

[MÁSTER UNIVERSITARIO EN ALTA ESPECIALIZACIÓN EN PLÁSTICOS Y CAUCHO](#)

### Créditos ECTS

2

### Carácter de la asignatura

OBLIGATORIA

### Duración

Cuatrimestral

### Idioma

Castellano

# CONTENIDOS

## Contenidos

La asignatura se incluye dentro del contexto de los materiales y sus aplicaciones, Módulo III "Materiales polímeros y aplicaciones avanzadas" y, en concreto, se refiere a los conocimientos sobre los métodos computacionales que se emplean en química macromolecular para tratar los aspectos relacionados con la reactividad y las propiedades de los monómeros y reactivos químicos, así como de los polímeros y sus propiedades en estado sólido.

En esta asignatura se se realiza una introducción a los métodos de simulación molecular en Química Orgánica y en Materiales, con especial incidencia en el campo de los polímeros. Se incidirá en la influencia que dichos métodos van a tener, en un futuro muy cercano, en la manera de abordar la investigación y en como van a permitir predecir el comportamiento de los materiales poliméricos antes de su obtención, con el consiguiente ahorro de tiempo y dinero en el diseño de estos materiales.

Se abordarán las principales metodologías existentes en la actualidad para el estudio de estos materiales y las posibilidades y limitaciones que ofrece cada una de ellas. El objetivo final de la asignatura es que el alumno sea capaz de abordar, mediante estas técnicas la resolución de problemas reales que se le presenten en el desarrollo de su trabajo.

## Objetivos de la asignatura

- Iniciar al alumno en los métodos de la química computacional.
- Introducir los métodos mecanocuánticos para estudiar aspectos relacionados con la reactividad y propiedades de los monómeros y de los reactivos químicos en general.
- Introducir los métodos de mecánica molecular y dinámica molecular para estudiar aspectos relacionados con las cadenas de los polímeros y sus propiedades en estado sólido, tanto amorfo como cristalino.
- Introducir los métodos de mesoescala para sistemas muy grandes, donde los métodos atomísticos exigen excesiva potencia de cálculo.
- Familiarizar al alumno con las herramientas comerciales mas utilizadas, para que pueda abordar por si mismo la resolución de problemas reales.

## Temario

Tema 1 - Introducción a la Simulación Molecular y la Química Computacional. Métodos de Química Computacional.

Tema 2 - Métodos clásicos

Tema 3 - Métodos mecano-cuánticos

Tema 4 - Aplicaciones prácticas (con programas en ordenador)

**Prácticas de simulación**

2 alumnos por ordenador resolviendo casos reales

**Evaluación**

Examen de la asignatura

## COMPETENCIAS

### Específicas

CE7.- Demostrar conocer la relación estructura-propiedades de las diferentes familias de polímeros y sus grados industriales, para poder seleccionar y aplicar los materiales, a las diferentes aplicaciones de las formulaciones de materiales polímeros.

CE8.- Demostrar conocer la relación estructura-propiedades de los materiales compuestos, sus posibilidades de diseño, preparación, nuevos métodos de procesado y sus aplicaciones.

CE9.- Demostrar que conoce y puede aplicar los conocimientos relativos a la Reología de polímeros y a la Simulación Molecular en las características de los materiales en relación con sus aplicaciones.

# PLAN DE APRENDIZAJE

## Actividades formativas

### Trabajo presencial (horas)

- Asistencia y participación en clases presenciales de teoría: 13 (parte de ellas con ordenador)
- Asistencia y realización de prácticas presenciales en laboratorios del CSIC y otras entidades y empresas participantes en el Máster: 5
- Sesiones de evaluación: 2

### Trabajo no presencial (horas)

- Trabajo autónomo o en grupo: 30

Este trabajo autónomo consistirá en el estudio de los contenidos teóricos y prácticos de la asignatura. Para ello, los estudiantes contarán con las informaciones disponibles en el [Aula Virtual](#), cuadernos de prácticas, libros de consulta y medios disponibles en el CSIC informáticos y de biblioteca.

## Metodologías docentes

Las clases teóricas serán complementadas con clases prácticas:

MD2.- Realización de prácticas en laboratorios con un guión previo para su mejor seguimiento y entendimiento.

MD3.- Resolución de casos prácticos de interés industrial con técnicas de caracterización y estudio de polímeros para complementar el conocimiento adquirido.

## Resultados de aprendizaje

Los estudiantes deberán haber adquirido al término de la asignatura los siguientes conocimientos:

1. Conocimiento del fundamento teórico de los diferentes métodos de simulación. Diferencias entre métodos clásicos y métodos mecanocuánticos.
2. Conocimiento de los diferentes métodos de cálculo y las alternativas posibles en función del tipo de problema.

3. Panorámica de las posibilidades de los métodos de simulación molecular y cuando pueden utilizarse para sustituir o complementar la experimentación.
4. Conocimiento de los diferentes programas de cálculo, tanto comerciales como académicos.

# SISTEMA DE EVALUACIÓN

## Descripción del sistema de evaluación

- Se realizará un examen al finalizar la asignatura (ponderación mínima 90 y máxima 100)
- Se planteará a los estudiantes un problema concreto para resolver, que podrán hacer en grupo (ponderación mínima 5 y máxima 10)

## Calendario de exámenes

- Fecha de examen en convocatoria ordinaria: 2 de abril de 2020



## PROFESORADO

### Profesor responsable

**Lozano López, Ángel E.**

*Investigador Científico  
Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros (ICTP)  
Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC)*

### Profesorado

**Ramos Díaz, Francisco Javier**

*Científico Titular  
Instituto de Estructura de la Materia (IEM)  
Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC)*

# HORARIO

## Horario

04/03/2024

17:00 - 19:00

Tema 1: Instalación y manejo básico de software usado en simulación molecular

Francisco Javier Ramos Díaz

Científico Titular  
Instituto de Estructura de la Materia (IEM)  
Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC)

05/03/2024

15:00 - 17:00

Tema 2: Introducción a la Simulación Molecular con métodos atomísticos clásicos

Francisco Javier Ramos Díaz

Científico Titular  
Instituto de Estructura de la Materia (IEM)  
Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC)

07/03/2024

15:00 - 17:00

Tema 3: Introducción teórico-práctica a los métodos mecano-cuánticos

Ángel E. Lozano López

Investigador Científico  
Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros (ICTP)  
Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC)

08/03/2024

17:00 - 19:00

Tema 4: Aplicaciones: Determinación teórica de la reactividad en procesos de formación de reacciones SEAr aromática mediante métodos de simulación molecular.

Ángel E. Lozano López

Investigador Científico  
Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros (ICTP)  
Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC)

11/03/2024

17:00 - 19:00

Práctica 2: Determinación de la reactividad en moléculas orgánicas 2 alumnos por ordenador resolviendo casos reales de simulación. Evaluación continua del alumno

Ángel E. Lozano López

Investigador Científico  
Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros (ICTP)  
Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC)

12/03/2024

15:00 - 19:00

Tema 5: Aplicaciones: introducción a las simulaciones en la mesoescala y multiescala

Francisco Javier Ramos Díaz

Científico Titular  
Instituto de Estructura de la Materia (IEM)  
Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC)

20/03/2024

15:00 - 19:00

Práctica 1: Modelización atomística y en la mesoescala de un sistema polimérico usando Materials Studio(MS) : Cada alumno realizará una serie de simulaciones prácticas con MS.  
Evaluación continua del alumno

Francisco Javier Ramos Díaz

Científico Titular  
Instituto de Estructura de la Materia (IEM)  
Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC)

01/04/2024

15:00 - 17:00

Evaluación: determinación teórica de la reactividad

Ángel E. Lozano López

Investigador Científico  
Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros (ICTP)  
Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC)

## BIBLIOGRAFÍA Y ENLACES RELACIONADOS

### Bibliografía

1. Alan Hinchliffe, *Modelling Molecular Structures*, Second Edition, John Wiley and Sons, 2001
2. Andrew Leach, *Molecular Modelling, Principles and Applications*, Second Edition, Pearson Prentice Hall, 2001
3. Donal W. Rogers, *Computational Chemistry Using the PC*, Third Edition, Wiley Interscience, 2003
4. Christopher J. Cramer, *Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models*, John Wiley and Sons, 2004.
5. Frank Jensen, *Introduction to Computational Chemistry*, Second Edition, John Wiley and Sons, 2006
6. Steven M. Bachrach, *Computational Organic Chemistry*, John Wiley and Sons, 2007
7. Kholmurzo Kholmurodov, *Molecular Simulation Studies in Material and Biological Sciences*, Nova Publishers, 2007
8. Alan Hinchliffe, *Molecular Modelling for Beginners*, Second Edition, John Wiley and Sons, 2008
9. Sándor Fliszár, *Atomic Charges, Bond Properties, and Molecular Energies*, John Wiley and Sons, 2008
10. Ian Fleming, *Molecular Orbitals and Organic Chemical Reactions*, John Wiley and Sons, 2009.
11. Purushottam D. Gujrati, Arkadii I. Leonov Eds. *Modeling and Simulation in Polymers*, John Wiley and Sons, 2010
12. Jan H. Jensen, *Molecular Modeling Basics*, CRC Press, 2010
13. Tamar Schlick, *Molecular Modeling and Simulation: An Interdisciplinary Guide*, Springer, 2010
14. Peter Comba, *Modeling of Molecular Properties*, John Wiley and Sons, 2011.
15. Thomas A. Albright, Jeremy K. Burdett, Myung-Hwan Whangbo, *Orbital Interactions in Chemistry*, John Wiley and Sons, 2013.