

31235 - TEORÍA AVANZADA DE LA ESTRUCTURA ELECTRÓNICA Y LA MATERIA CONDENSADA

Información de la asignatura

Código - Nombre: 31235 - TEORÍA AVANZADA DE LA ESTRUCTURA ELECTRÓNICA Y LA MATERIA CONDENSADA

Titulación: 616 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2013)
651 - Máster Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelización Computacional
751 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional Europeo

Centro: 104 - Facultad de Ciencias

Curso Académico: 2020/21

1. Detalles de la asignatura

1.1. Materia

Dinámica Química y Molecular y Simulación y Modelización por Ordenador.

1.2. Carácter

Obligatoria

1.3. Nivel

Máster (MECES 3)

1.4. Curso

2

1.5. Semestre

118-Anual

751-Anual o Primer semestre

651-Anual o Primer semestre

616-Anual o Primer semestre

621-Anual

1.6. Número de créditos ECTS

9.0

1.7. Idioma

Inglés

1.8. Requisitos previos

Código Seguro de Verificación: Fecha: 23/06/2020

Firmado por: *Esta guía docente no está firmada mediante CSV porque no es la versión definitiva*

Url de Verificación: Página: 1/4

No hay.

1.9. Recomendaciones

No hay

1.10. Requisitos mínimos de asistencia

La asistencia a las clases es obligatoria.

1.11. Coordinador/es de la asignatura

Manuel Alcami Pertejo

<https://autoservicio.uam.es/paginas-blancas/>

1.12. Competencias y resultados del aprendizaje

1.12.1. Competencias

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.

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.

1.12.2.Resultados de aprendizaje

Familiarizar a los estudiantes con las posibilidades que ofrece los métodos Coupled Cluster para el cálculo de una variedad de propiedades moleculares, que representan esencialmente la respuesta del sistema molecular a una perturbación electromagnética.

- Aprender las bases teóricas de los métodos, proporcionando información sobre el método de onda plana-pseudopotencial y las técnicas de Transformada Rápida de Fourier.
- Cálculo, utilizando métodos DFT, de propiedades moleculares de sistemas grandes, tanto para moléculas como para materiales
- Obtener una descripción teórica de la estructura electrónica que se puede utilizar para interpretar datos experimentales, predecir fenómenos interesantes y / o desarrollar nuevos conceptos teóricos
- Introducir la teoría de Valence Bond (VB).
- Aprender a interpretar los resultados de diferentes cálculos de Valence Bond utilizando diferentes modelos orbitales.
- Aprender Métodos multireferenciales
- Aprender a analizar la función de onda usando diferentes metodologías (AIM, ELF, NBO...)

1.13.Contenidos del programa

- Introducción a la química computacional: teoría funcional de densidad para optimizaciones de geometría y enfoque de clúster acoplado para energías.
- Teoría avanzada de la estructura electrónica relacionada con los métodos post Hartree-Fock Estados electrónicos emocionados.
- Introducción a Valence Bond Theory.
- Dinámica cuántica para la espectroscopía vibracional nuclear.
- Determinación de propiedades moleculares en el enfoque Coupled Cluster
- Química cuántica relativista.
- Modelado de sistemas moleculares grandes con conjuntos de bases de ondas planas.
- Métodos multireferenciales
- Análisis de la función de onda (AIM, ELF, NBO...)

1.14.Referencias de consulta

- [1] Introduction to quantum mechanics, David J. Tannor, University Science Books (2007).
[2] A method for solving the molecular Schrödinger equation in Cartesian coordinates via angular momentum projection operators. J. Suarez, S. Stamatiadis, L. Lathouwers, S.C. Farantos, Comp. Phys. Comm. 180, p225 (2009).
[3] Quantum Molecular Dynamics on Grids, R. Kosloff, Dynamics of Molecules and Chemical Reactions (editors R. E. Wyatt and J. Z. H. Zhang), CRC Press (1996).

2.Metodologías docentes y tiempo de trabajo del estudiante

2.1.Presencialidad

horas

Porcentaje de actividades presenciales (mínimo 33% del total) 64 horas

Porcentaje de actividades no presenciales 161 horas

2.2.Relación de actividades formativas

Actividades presenciales	Nº horas
--------------------------	----------

Clases teóricas en aula.....	56
------------------------------	----

Seminarios	8
------------------	---

Clases prácticas en aula

Prácticas clínicas

Prácticas con medios informáticos

Prácticas de campo

Prácticas de laboratorio

Prácticas externas y/o practicum

Trabajos académicamente dirigidos

Tutorías

Actividades de evaluación

Otras

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 y las dudas sobre las metodologías empleadas.

Tutorías. El profesor realizará tutorías individuales o con grupos reducidos sobre cuestiones puntuales que los estudiantes puedan plantear.

3.Sistemas de evaluación y porcentaje en la calificación final

3.1.Convocatoria ordinaria

La nota final de la asignatura se basará en:

- 70% realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura.
- 30% exámenes realizados a final de cada semana con los contenidos visto durante la misma.

3.1.1.Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación %

Entrega de ejercicios	70 %
-----------------------------	------

Test al final de cada semana.....	30 %
-----------------------------------	------

3.2.Convocatoria extraordinaria

El 100% de la nota será la que se obtenga de la entrega de los ejercicios planteados por los profesores de la asignatura.

3.2.1.Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación %

Entrega de ejercicios...	100 %
--------------------------	-------

4.Cronograma orientativo

La 15ª edición del Curso Intensivo Internacional del máster tendrá lugar en la Universidad Autónoma de Madrid. Todos los detalles del curso estarán disponible en la página web del máster: www.emtccm.org.

Se ofrecerá la posibilidad de seguir todas las sesiones por videoconferencia dada la situación excepcional que se está viviendo con el covid19.

31236 - TÉCNICAS COMPUTACIONALES AVANZADAS

Información de la asignatura

Código - Nombre: 31236 - TÉCNICAS COMPUTACIONALES AVANZADAS

Titulación: 616 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2013)

651 - Máster Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelización Computacional

748 - Máster Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelización Computacional

751 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional Europeo

Centro: 104 - Facultad de Ciencias

Curso Académico: 2020/21

1. Detalles de la asignatura

1.1. Materia

Técnicas Computacionales Avanzadas.

1.2. Carácter

751 - Obligatoria

651 - Obligatoria

748 - Optativa

616 - Obligatoria

1.3. Nivel

Máster (MECES 3)

1.4. Curso

2

1.5. Semestre

118-Anual

751-Anual o Primer semestre

651-Anual o Primer semestre

748-Anual o Primer semestre

616-Anual o Primer semestre

621-Anual

1.6. Número de créditos ECTS

6.0

1.7. Idioma

Inglés

1.8. Requisitos previos

No hay

1.9. Recomendaciones

No hay

1.10. Requisitos mínimos de asistencia

La asistencia a las clases es obligatoria.

1.11. Coordinador/es de la asignatura

Manuel Alcami Pertejo

<https://autoservicio.uam.es/paginas-blancas/>

1.12. Competencias y resultados del aprendizaje

1.12.1. Competencias

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:

CE22 - Conoce la existencia de técnicas computacionales avanzadas tales como: canalización de instrucciones y datos, procesadores superescalar y multiescalares, operaciones en cadena, plataformas en paralelo, etc.

1.12.2.Resultados de aprendizaje

Resultados del aprendizaje:

Plantear o reconocer la ecuación de Schödinger de sistemas modelo en presencia de condiciones externas para plantear su resolución con medios informáticos.

- Saber utilizar redes de computo de altas prestaciones en Red Deslocalizada (Grid o similares).
- Conocer al menos una biblioteca ("library") de rutinas de cálculo numérico paralelo usando algún problema como referencia (por ejemplo, sistemas magnéticos).
- Conocer las bases de la computación cuántica y su aplicación a Química Teórica

1.13.Contenidos del programa

- Computación en Grid
- Técnicas de paralelización masiva: memoria compartida y memoria distribuida
- Utilización de librerías matemáticas masivamente paralelas.
- Computación Cuántica

1.14.Referencias de consulta

Se informará sobre el material de consulta para todas las asignaturas con la suficiente antelación en la página web del Curso Intensivo.

2.Metodologías docentes y tiempo de trabajo del estudiante

2.1.Presencialidad

Porcentaje de actividades presenciales (mínimo 33% del total) 42 horas

Porcentaje de actividades no presenciales 108 horas

2.2.Relación de actividades formativas

Actividades presenciales	Nº horas
Clases teóricas en aula.....	32
Seminarios	

Clases prácticas en aula	
Prácticas clínicas	
Prácticas con medios informáticos	
Prácticas de campo	
Prácticas de laboratorio	
Prácticas externas y/o practicum	
Trabajos académicamente dirigidos	
Tutorías	10
Actividades de evaluación	
Otras	

Clases en aula de informática: La docencia se impartirá en un aula de informática. Las clases, en sesiones de dos horas, incluirán una introducción teórica breve, en la que el profesor o profesora expondrá los conceptos básicos, y aplicaciones prácticas, y una parte práctica, en la que el estudiante aprenderá a través de la resolución de casos prácticos.

Seminarios. En ellos se discutirán los resultados obtenidos en los trabajos propuestos y las dudas sobre las metodologías empleadas.

Tutorías. El profesor realizará tutorías individuales o con grupos reducidos sobre cuestiones puntuales que los estudiantes puedan plantear.

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.

3.Sistemas de evaluación y porcentaje en la calificación final

3.1.Convocatoria ordinaria

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 realizadas en la asignatura.

3.1.1.Relación actividades de evaluación

Actividad de Evaluación %

Entrega de ejercicios de la asignatura o de informe crítico. 60 %

Discusión en tutorías y/o seminarios sobre los ejercicios, trabajos o prácticas. 40%

3.2.Convocatoria extraordinaria

El 100% de la nota será la que se obtenga de la entrega de los ejercicios planteados por los profesores de la asignatura.

3.2.1.Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación %

Entrega de ejercicios 100 %

4.Cronograma orientativo

La asignatura de Técnicas Computacionales Avanzadas será impartida por la Universidad de Groningen en el formato de curso intensivo en el mes de noviembre de 2020. Debido a las circunstancias excepcionales del covid19 todas las sesiones estarán también disponible en formato online para todos los estudiantes que no puedan asistir.

Toda la información del curso está disponible en la página web del máster: www.emtccm.org

31237- DINÁMICA QUÍMICA Y MOLECULAR Y SIMULACIÓN Y MODELIZACIÓN POR ORDENADOR

Información de la asignatura

Código - Nombre: 31237 - DINÁMICA QUÍMICA Y MOLECULAR Y SIMULACIÓN Y MODELIZACIÓN POR ORDENADOR

Titulación: 616 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2013)

651 - Máster Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelización Computacional

751 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional Europeo

Centro: 104 - Facultad de Ciencias

Curso Académico: 2020/21

1. Detalles de la asignatura

1.1. Materia

Dinámica Química y Molecular y Simulación y Modelización por Ordenador.

1.2. Carácter

Obligatoria

1.3. Nivel

Máster (MECES 3)

1.4. Curso

2

1.5. Semestre

118-Anual

751-Anual o Primer semestre

651-Anual o Primer semestre

616-Anual o Primer semestre

621-Anual

1.6. Número de créditos ECTS

9.0

1.7. Idioma

Inglés

1.8. Requisitos previos

No hay.

1.9. Recomendaciones

No hay.

1.10. Requisitos mínimos de asistencia

La asistencia a las clases es obligatoria.

1.11. Coordinador/es de la asignatura

Manuel Alcami Pertejo

<https://autoservicio.uam.es/paginas-blancas/>

1.12. Competencias y resultados del aprendizaje

1.12.1. Competencias

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 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 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.

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.

1.12.2.Resultados de aprendizaje

- Esbozar los principios básicos del enfoque del paquete de ondas dependiente del tiempo.
- 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.
- Conocer los métodos que combinan dinámicas clásicas con descripción cuántica de partes del sistema
- Conocer las técnicas que permiten acoplar el movimiento electrónico y nuclear.

1.13.Contenidos del programa

- Fundamentos de Dinámica Molecular
- Dinámica Molecular Clásica. Fuerzas intermoleculares. Campos de Fuerza
- Métodos QM/MM
- Tratamiento explícito del solvente
- Teoría del estado de Transición
- Dinámicas Moleculares Ab Initio
- Método Carr-Parrinello
- Acomplamiento entre el movimiento nuclear y electrónico
- Métodos basados en paquetes de onda.

1.14.Referencias de consulta

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

- "Elements of Molecular Dynamics", by W. Smith 2014.

2.Metodologías docentes y tiempo de trabajo del estudiante

2.1.Presencialidad

horas

Porcentaje de actividades presenciales (mínimo 33% del total) 63 horas

Porcentaje de actividades no presenciales..... 162 horas

2.2.Relación de actividades formativas

Actividades presenciales	Nº horas
Clases teóricas en aula	56
Seminarios	7
Clases prácticas en aula	
Prácticas clínicas	
Prácticas con medios informáticos	
Prácticas de campo	
Prácticas de laboratorio	
Prácticas externas y/o practicum	
Trabajos académicamente dirigidos	
Tutorías	
Actividades de evaluación	
Otras	

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.

3.Sistemas de evaluación y porcentaje en la calificación final

3.1.Convocatoria ordinaria

La nota final de la asignatura se basará en:

- 70% realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura.
- 30% de exámenes realizados a final de cada semana con los contenidos visto durante la misma.

3.1.1.Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación %

Entrega de ejercicios 70 %

Test al final de cada semana del curso intensivo 30 %

3.2.Convocatoria extraordinaria

El 100% de la nota será la que se obtenga de la entrega de los ejercicios planteados por los profesores de la asignatura.

3.2.1.Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación %

Entrega de ejercicios 100 %

4.Cronograma orientativo

La 15ª edición del Curso Intensivo Internacional del máster tendrá lugar en la Universidad Autónoma de Madrid. El curso se realizará en el campus de la UAM. Todos los detalles del curso estarán disponible en la página web del máster:

www.emtccm.org.

Se ofrecerá la posibilidad de seguir todas las sesiones por videoconferencia dada la situación excepcional que se está viviendo con el covid19.

31238 – APLICACIONES

Información de la asignatura

Código - Nombre: 31238 - APLICACIONES

Titulación: 616 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2013)

651 - Máster Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelización Computacional

751 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional Europeo

Centro: 104 - Facultad de Ciencias

Curso Académico: 2020/21

1. Detalles de la asignatura

1.1. Materia

Teoría Avanzada de la Estructura Electrónica y la Materia Condensada

1.2. Carácter

Obligatoria

1.3. Nivel

Máster (MECES 3)

1.4. Curso

2

1.5. Semestre

751-Anual o Primer semestre

651-Anual o Primer semestre

616-Anual o Primer semestre

621-Anual

1.6. Número de créditos ECTS

6.0

1.7. Idioma

English

1.8. Requisitos previos

No hay

1.9. Recomendaciones

No hay.

1.10. Requisitos mínimos de asistencia

La asistencia a las clases es obligatoria.

1.11. Coordinador/es de la asignatura

Manuel Alcamí Pertejo

<https://autoservicio.uam.es/paginas-blancas/>

1.12. Competencias y resultados del aprendizaje

1.12.1. Competencias

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

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:

CE20 - Conoce y evalúa críticamente la aplicabilidad de los métodos avanzados de la Química Cuántica a los sistemas cuasidegenerados, tales como, sistemas con metales de transición o estados excitados (su espectroscopia y reactividad).

CE21 - Conoce las teorías y los métodos de cálculo para el estudio de sólidos y superficies; evaluación crítica de su aplicabilidad a problemas de catálisis, magnetismo, conductividad, etc.

1.12.2.Resultados de aprendizaje

-Alcanzar las competencias generales y específicas de la materia y adquirir los conocimientos teóricos y prácticos descritos en sus contenidos.

-Desarrollar las competencias de carácter personal, interpersonal y vinculado al desarrollo ético y responsable de la profesión.

1.13.Contenidos del programa

En cada curso se ofertarán distintos itinerarios para que el estudiante se oriente hacia las aplicaciones de la Química a diversas áreas. En particular se ofertarán las siguientes opciones

- Modelización de materiales: este itinerario estará orientado a la modelización de materiales, cubriendo aspectos como catálisis heterogénea, deposición de moléculas para la producción de dispositivos fotoelectrónicos basados en moléculas orgánicas, células solares y magnetismo.

- Métodos de Multiescala, Machine Learning y QSAR aplicados a biomoléculas; este itinerario estará orientado a la modelización de biomoléculas de gran tamaño y a la predicción de sus propiedades y potenciales aplicaciones

- Proyecto de programación de química computacional. Los estudiantes tendrán que desarrollar un proyecto propio de aplicación de Química Teórica utilizando los conocimientos adquiridos en otras asignaturas y desarrollando herramientas propias para la aplicación al sistema de su interés.

- De la teoría a la implementación: tutoriales en química teórica. Se trata de un contenido eminentemente práctico donde los estudiantes se deben enfrentar a problemas que tienen que resolver usando métodos computacionales, tanto aplicando métodos ya programados como desarrollando sus propias aplicaciones. Se trata de resolver un número amplio de problemas modelo o sencillos que cubren distintas áreas de la Química Computacional. El estudiante recibirá herramientas que tiene que reprogramar para resolver el problema asignado.

1.14.Referencias de consulta

1- Photochemistry A Modern Theoretical Perspective
Series: Theoretical Chemistry and Computational Modelling
Persico, Maurizio, Granucci, Giovanni
Springer 2018

2- Chemical Reactions Basic Theory and Computing
Series: Theoretical Chemistry and Computational Modelling
Laganà, Antonio, A. Parker, Gregory
Springer 2018

3- Magnetic Interactions in Molecules and Solids
Series: Theoretical Chemistry and Computational Modelling
de Graaf, Coen, Broer, Ria
Springer 2016

2. Metodologías docentes y tiempo de trabajo del estudiante

2.1. Presencialidad

horas

Porcentaje de actividades presenciales (mínimo 33% del total) 42 horas

Porcentaje de actividades no presenciales 108 horas

2.2. Relación de actividades formativa

Actividades presenciales	Nº horas
Clases teóricas en aula	32
Seminarios	10
Clases prácticas en aula	
Prácticas clínicas	
Prácticas con medios informáticos	
Prácticas de campo	
Prácticas de laboratorio	
Prácticas externas y/o practicum	
Trabajos académicamente dirigidos	
Tutorías	
Actividades de evaluación	
Otras	

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 y las dudas sobre las metodologías empleadas.

Tutorías. El profesor realizará tutorías individuales o con grupos reducidos sobre cuestiones puntuales que los estudiantes puedan plantear.

3. Sistemas de evaluación y porcentaje en la calificación final

3.1. Convocatoria ordinaria

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 realizadas en la asignatura.

3.1.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación %

Entrega de ejercicios de la asignatura o de informe crítico. 60 %

Discusión en tutorías y/o seminarios sobre los ejercicios, trabajos o prácticas. 40 %

3.2. Convocatoria extraordinaria

El 100% de la nota será la que se obtenga de la entrega de los ejercicios planteados por los profesores de la asignatura.

3.2.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación %

Entrega de ejercicios 100 %

4.Cronograma orientativo

La asignatura aplicaciones se dará en formato de curso intensivo y tendrá distintos itinerarios que se ofertaran a los estudiantes (quienes deberán escoger uno):

Multiescala, Machine Learning y métodos QSAR aplicados a biomoléculas

La enseñanza de este curso tendrá lugar en la Universidad de Perugia del 25 al 31 de Octubre y se centrará en las técnicas de modelización de sistemas biomoleculares de gran tamaño. Este curso intensivo se complementará con clases y seminarios online.

Proyecto de programación de química computacional

Se trata de una asignatura especial en el sentido de que se enseñará a distancia de Octubre a Diciembre, pero con el apoyo de supervisores locales y con un alto contenido práctico. La enseñanza a distancia se utilizará no sólo para hacer conferencias normales a través de Internet, sino también para utilizar otras técnicas a distancia como grupos de discusión, trabajo en colaboración, etc., con el fin de resolver un problema práctico mediante el uso de técnicas computacionales.

De la teoría a la implementación: tutoriales en química teórica

Este curso se imparte de forma intensiva (8 días) en Enero de 2021 y está organizado por la Universidad Paul Sabatier

Toulouse III en colaboración con el nodo CECAM de Toulouse. Este curso intensivo se complementará con clases y seminarios on-line.

Métodos teóricos para la simulación de materiales

Será co-organizado entre la UAM y el CECAM y se realizará del 14 al 25 de Septiembre. Este curso intensivo se complementará con clases y seminarios on-line.