



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE MADRID

32533 - BIOQUÍMICA COMPUTACIONAL

Información de la asignatura

Código - Nombre: 32533 - BIOQUÍMICA COMPUTACIONAL

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
762 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2021)

Centro: 104 - Facultad de Ciencias

Curso Académico: 2023/24

1. Detalles de la asignatura

1.1. Materia

Bioquímica Computacional.

1.2. Carácter

Optativa

1.3. Nivel

Máster (MECES 3)

1.4. Curso

1

1.5. Semestre

Anual

1.6. Número de créditos ECTS

5.0

1.7. Idioma

English

1.8. Requisitos previos

No hay.

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	1/4
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	1/4	

1.9. Recomendaciones

No hay.

1.10. Requisitos mínimos de asistencia

La asistencia a las clases es obligatoria.

1.11. Coordinador/a de la asignatura

Vicent Moliner - Universidad Jaume I de Castellón.

<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.

CG02 - Los estudiantes son capaces de resolver problemas y tomar decisiones de cualquier índole bajo el compromiso con la defensa y práctica de las políticas de igualdad.

TRANSVERSALES:

CT01 - El/la estudiante es capaz de adaptarse a diferentes entornos culturales demostrando que responde al cambio con flexibilidad.

CT02 - El/la estudiante es organizado en el trabajo demostrando que sabe gestionar el tiempo y los recursos de que dispone.

CT03 - El/la estudiante posee capacidad de análisis y síntesis de tal forma que pueda comprender, interpretar y evaluar la información relevante asumiendo con responsabilidad su propio aprendizaje o, en el futuro, la identificación de salidas profesionales y yacimientos de empleo.

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.

CE03 - Adquiere una visión global de las distintas aplicaciones de la Química Teórica y modelización en campos de la Química, Bioquímica, Ciencias de Materiales, Astrofísica y Catálisis.

CE04 - Comprende los fundamentos teóricos y prácticos de técnicas computacionales con las que puede analizar la estructura electrónica, morfológica y estructural de un compuesto e interpreta adecuadamente los resultados

CE05 - Manejar las principales fuentes de información científica relacionadas con la Química Teórica y Modelización Computacional, siendo capaz de buscar información relevante en química en páginas web de datos estructurales, de datos experimentales químico físicos, en bases de datos de cálculos moleculares, en base de datos bibliográficas científicas y en la lectura crítica de trabajos científicos.

CE25 - Los estudiantes adquieren los conocimientos prácticos necesarios para llevar a cabo estudios en sistemas bioquímicos utilizando simulaciones computacionales.

1.12.2. Resultados de aprendizaje

Conocer las principales características de la estructura de las moléculas biológicas y de las interacciones que la determinan. Comprender las bases teóricas de las principales técnicas utilizadas en la simulación de biomoléculas y ser capaces aplicar estas técnicas a casos sencillos. Reconocer las limitaciones de cada método de modelización y saber elegir el más adecuado para resolver un problema concreto.

1.12.3. Objetivos de la asignatura

-

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	2/4
Firmado por:	Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas			
Url de Verificación:		Página:	2/4	

1.13. Contenidos del programa

1. Introducción. Biomoléculas y sus propiedades. Bases de datos estructurales de biomoléculas. Relación estructura-energía: Modelización de biomoléculas.
2. Superficies de energía potencial en biomoléculas. Mecánica Molecular. Campos de fuerzas de Mecánica Molecular. Exploración conformacional. Minimización: Coordenada de reacción. Métodos de Dinámica Molecular y Monte Carlo. Métodos de predicción de estructura.
3. Métodos avanzados de Dinámica Molecular. Ampliación de técnicas de muestreo conformacional, umbrella sampling, accelerated molecular dynamics y replica Exchange.
4. Modelos mixtos QM/MM. Inmersión electrostática y polarizable. Modelos continuos de solvatación. Extensión a estados excitados.
5. Relaciones estructura-actividad. Descriptores moleculares. Relaciones cuantitativas estructura-actividad (QSAR).
6. Interacciones proteína-ligando. Técnicas de docking.

1.14. Referencias de consulta

- Molecular Modeling and Simulation: An Interdisciplinary Guide
- Tamar Schlick Springer Understanding Molecular Simulation, Second Edition: From Algorithms to Applications Daan Frenkel - Academic Press
- Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models Chris Cramer Wiley

2. Metodologías docentes y tiempo de trabajo del estudiante

2.1. Presencialidad

	#horas
Porcentaje de actividades presenciales (mínimo 33% del total)	50
Porcentaje de actividades no presenciales	75

2.2. Relación de actividades formativas

Actividades presenciales	Nº horas
Clases teóricas en aula	20
Seminarios	
Clases prácticas en aula	20
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	

Lección Magistral: El profesor expondrá los contenidos del curso en sesiones presenciales de dos horas basándose en los materiales docentes publicados en la plataforma Moodle.

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.

Clases en aula de informática. La docencia se impartirá en un aula de informática. Las clases, en sesiones de tres 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.

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

Informes o memorias escritas: Orientación y supervisión en la preparación de informes o memorias escritas.

3. Sistemas de evaluación y porcentaje en la calificación final

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	3/4
Firmado por:	Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas			
Url de Verificación:		Página:	3/4	

3.1. Convocatoria ordinaria

El aprendizaje y la formación adquirida por el estudiante serán evaluados a lo largo de todo el curso, intentando que el estudiante avance de forma regular y constante en la asimilación de los contenidos de la asignatura.

La nota final de la asignatura se basará en los ejercicios, trabajos y discusión de los mismos que se irá realizando durante el curso. Dichos trabajos se puntuarán en base a los siguientes porcentajes:

- 10 % la asistencia y participación en clase,
- 90% realización y defensa de un caso práctico. Parte de este porcentaje podrá aplicarse a la realización de controles.

3.1.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Examen final (máximo 70% de la calificación final o el porcentaje que figure en la memoria)	
Evaluación continua	

3.2. Convocatoria extraordinaria

Se realizará un examen final único que será de carácter teórico y práctico, y que abarcará los contenidos de toda la asignatura. La parte práctica constará de un trabajo individual que tiene que realizar el estudiante con los programas utilizados a lo largo del curso. La puntuación en la convocatoria extraordinaria se realizará en base a los siguientes porcentajes:

- 60 % el examen teórico,
- 40 % el examen práctico.

3.2.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Examen final (máximo 70% de la calificación final o el porcentaje que figure en la memoria)	
Evaluación continua	

4. Cronograma orientativo

Por favor, comprobar el horario oficial publicado en la página web del Máster.

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	4/4
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	4/4	



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE MADRID

33422 - COMPETENCIA CIENTÍFICA Y LINGÜÍSTICA TRANSVERSAL

Información de la asignatura

Código - Nombre: 33422 - COMPETENCIA CIENTÍFICA Y LINGÜÍSTICA TRANSVERSAL

Titulación: 748 - Máster Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelización Computacional
762 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2021)

Centro: 104 - Facultad de Ciencias

Curso Académico: 2023/24

1. Detalles de la asignatura

1.1. Materia

COMPETENCIA CIENTÍFICA Y LINGÜÍSTICA TRANSVERSAL

1.2. Carácter

Obligatoria

1.3. Nivel

Máster (MECES 3)

1.4. Curso

1

1.5. Semestre

762-Anual o Primer semestre
748-Anual o Primer semestre
621-Anual

1.6. Número de créditos ECTS

5.0

1.7. Idioma

Inglés

1.8. Requisitos previos

No hay

1.9. Recomendaciones

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	1/3
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	1/3	

No hay

1.10. Requisitos mínimos de asistencia

La asistencia es obligatoria.

1.11. Coordinador/a de la asignatura

Cristina Sanz Sanz - Universidad Autónoma de Madrid

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

1.12. Competencias y resultados del aprendizaje

1.12.1. Competencias

Competencias Básicas y Generales:

- Comprender y poseer conocimientos.
- Aplicación de conocimientos.
- Capacidad de emitir juicios.
- Capacidad de comunicar y aptitud social.
- Habilidad para el aprendizaje.

Competencias Transversales:

- Conocimiento de una segunda lengua.
- Conocimientos básicos de la profesión.
- Comunicación oral y escrita en la propia lengua.
- Habilidad en el uso de las TIC.
- Capacidad de crítica y autocrítica.
- Capacidad para aprender a trabajar de forma autónoma.

Competencias Específicas:

-Conocimiento de los fundamentos de comunicación científica escrita y oral; conocimiento de los bases de datos más relevantes para localizar información relacionada con la química teórica.

1.12.2. Resultados de aprendizaje

El estudiante será capaz de realizar búsquedas en recursos bibliográficos tipo Scopus o Web of Science, preparar una presentación clara y eficaz, conocerá el marco de financiación de los proyectos y tendrá las nociones necesarias para redactar un artículo científico.

Además se fomentará el aprendizaje y aumento de competencias lingüísticas de una Lengua Europea

1.12.3. Objetivos de la asignatura

Dotar al estudiante de las herramientas transversales necesarias para completar su formación científica. Aparte de las labores de investigación, un investigador debe ser capaz de comunicar la ciencia que hace, así como también de gestionar los recursos que tiene. Esta asignatura tiene como objetivo un primer acercamiento a las bases del conocimiento necesario para poder realizar esas tareas.

Aprendizaje de una lengua, fomentándose las Europeas

1.13. Contenidos del programa

- Búsqueda en bases de datos de publicaciones científicas.
- Gestión de referencias bibliográficas.
- Comunicación y difusión de la ciencia. Presentaciones orales y pósteres.
- Escritura científica: los pasos para escribir un artículo.
- La financiación en la ciencia: cómo funciona el marco nacional y europeo.
- Gestión de proyectos.

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	2/3
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	2/3	

1.14. Referencias de consulta

Básica

-Day, R., Gastel, B.. How to write and publish a scientific paper.. Cambridge University Press. 2006.

-Davis, M. Scientific papers and presentations. 2005.

2. Metodologías docentes y tiempo de trabajo del estudiante

2.1. Presencialidad

	#horas
Porcentaje de actividades presenciales	35
Porcentaje de actividades no presenciales	90

2.2. Relación de actividades formativas

Actividades presenciales	Nº de horas
Clases teóricas en aula	20
Seminarios	15

3. Sistemas de evaluación y porcentaje en la calificación final

3.1. Convocatoria ordinaria

Los conocimientos adquiridos por el estudiante serán evaluados a lo largo de todo el curso, intentando que el estudiante avance de forma regular y constante en la asimilación de los contenidos de la asignatura.

La nota final de la asignatura se basará en la evaluación continua y una presentación oral y la entrega de un proyecto final. Dichas tareas engloban los conocimientos adquiridos a lo largo de la asignatura. También se evaluará la participación en las clases a lo largo del curso a través de ejercicios. Dichos trabajos se puntuarán en base a los siguientes porcentajes:

- 60% examen práctico que consistirá en la presentación oral y entrega de proyecto final.
- 40% Ejercicios de evaluación continua durante el curso.

3.1.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Presentación oral y entrega de proyecto final	60
Evaluación Continua	40

3.2. Convocatoria extraordinaria

En la convocatoria extraordinaria el 100% de la nota vendrá dada por la entrega de un conjunto de tareas relacionadas con la asignatura.

3.2.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Entrega de tareas final	100

4. Cronograma orientativo

El horario de la asignatura vendrá especificado en el horario del máster que está disponible en la página web.

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	3/3
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	3/3	



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE MADRID

30576 - DINÁMICA DE LAS REACCIONES QUÍMICAS

Información de la asignatura

Código - Nombre: 30576 - DINÁMICA DE LAS REACCIONES QUÍMICAS

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
762 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2021)

Centro: 104 - Facultad de Ciencias

Curso Académico: 2023/24

1. Detalles de la asignatura

1.1. Materia

Dinámica de las Reacciones Químicas

1.2. Carácter

Optativa

1.3. Nivel

Máster (MECES 3)

1.4. Curso

1

1.5. Semestre

Anual

1.6. Número de créditos ECTS

5.0

1.7. Idioma

English

1.8. Requisitos previos

No hay

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	1/4
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	1/4	

1.9. Recomendaciones

No hay

1.10. Requisitos mínimos de asistencia

La asistencia a las clases es obligatoria.

1.11. Coordinador/a de la asignatura

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

1.12. Competencias y resultados del aprendizaje

1.12.1. Competencias

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

BÁSICAS Y GENERALES:

CB6 - Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación.

CB7 - Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.

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.

CT03 - El/la estudiante posee capacidad de análisis y síntesis de tal forma que pueda comprender, interpretar y evaluar la información relevante asumiendo con responsabilidad su propio aprendizaje o, en el futuro, la identificación de salidas profesionales y yacimientos de empleo.

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.

CE05 - Manejar las principales fuentes de información científica relacionadas con la Química Teórica y Modelización Computacional, siendo capaz de buscar información relevante en química en páginas web de datos estructurales, de datos experimentales químicos físicos, en bases de datos de cálculos moleculares, en base de datos bibliográficas científicas y en la lectura crítica de trabajos científicos.

CE26 - Los estudiantes saben relacionar observaciones macroscópicas llevadas a cabo dentro del campo de la Cinética Química con las colisiones individuales que tienen lugar a nivel molecular.

1.12.2. Resultados de aprendizaje

Resultados del aprendizaje:

La Dinámica de Reacciones Químicas permite conectar las observaciones macroscópicas llevadas a cabo dentro del campo de la Cinética Química con las colisiones individuales que tienen lugar a nivel molecular. El objeto del presente curso es proporcionar a los estudiantes una visión general de esta rama de la química física, haciendo especial hincapié en los siguientes aspectos:

- Relación entre las magnitudes microscópicas y macroscópicas.
- Fundamento, características y limitaciones de los métodos teóricos de común aplicación en la Dinámica de Reacciones.
- Mecanismos de reacción a nivel molecular.
- Técnicas experimentales.

1.12.3. Objetivos de la asignatura

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	2/4
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	2/4	

1.13. Contenidos del programa

-Dinámica molecular de reacciones: conceptos introductorios de la dinámica molecular de reacciones. Tipos de colisiones moleculares. Ángulo de dispersión. Velocidad de reacción y sección eficaz. Función excitación. Función opacidad. Sección eficaz diferencial. Métodos teóricos en dinámica de colisiones: métodos cuánticos y de trayectorias cuasiclásicas (QCT). Observables experimentales. Mecanismo de las colisiones reactivas. Superficies de energía potenciales. Ejemplos: Cl + HI, F + H₂. Sesión práctica.

-Teorías de las velocidades de reacción: Introducción a la cinética química. Velocidad de reacción, constante de velocidad, orden de reacción y ecuaciones diferenciales de velocidad. Teoría del estado de transición convencional (TST): formulaciones estadística y termodinámica, cálculo de funciones de partición. Teoría variacional del estado de transición (VTST). Correcciones de efecto túnel. Sesión práctica: aplicación VTST a la reacción H + CH₃CH₂OH -> H₂ + CH₃CHOH.

-Métodos automáticos para la predicción de mecanismos de reacción. Simulación de reacciones químicas acopladas mediante Monte Carlo cinético. Sesión práctica: descomposición unimolecular del ácido fórmico.

-Dinámica Molecular: Las ecuaciones clásicas del movimiento. Algoritmos de integración numérica. Condiciones periódicas de contorno. Tipos de colectivos. Termostatos y barostatos. Campos de fuerzas: tipos y su coste computacional. Ejemplos. Sesión práctica.

-Estudio teórico del mecanismo y cinética de reacciones enzimáticas: Revisión de la mecánica cuántica / mecánica molecular (QM/MM). Superficies de energía potencial QM/MM. Dinámica molecular QM/MM: método de muestreo del paraguas. EA-VTST/MT: cálculo de la constante de velocidad en reacciones enzimáticas. Ejemplos: reacciones de la proteasa HCV NS3/NS4A. Sesión práctica.

-Cálculo de los coeficientes cinéticos de las reacciones químicas mediante la dinámica cuántica: Constantes de velocidad a partir de funciones de correlación de flujo. Estados propios de flujo térmico: interpretación física. Método multiconfiguracional dependiente del tiempo de Hartree (MCTDH). Cálculos politámicos de referencia. Ejemplos: H + CH₄, N + N₂.

-Dinámica cuántica de paquetes de onda: visión general y aplicaciones a reacciones químicas. Introducción a la dinámica de reacción. Dispersión cuántica. Propagadores. Observables. Matriz S. Paquete de ondas. Representaciones. Hamiltoniano Método del paquete de onda real. Ejemplos: He + HeH⁺, Ne + H₂⁺ y H + OH. Sesión práctica.

1.14. Referencias de consulta

- 1.- "Molecular Reaction Dynamics", Raphael D. Levine, Cambridge University Press, 2005.
- 2.- "Tutorials in Molecular Reaction Dynamics", Mark Brouard and Claire Vallance, Royal Society of Chemistry, 2011.
- 3.- "Chemical kinetics", Keith J. Laidler, Harper&Row, 1987.
- 4.- "Theory of Chemical Reaction Dynamics", Michael Baer (Ed.), Vol IV, CRC Press, 1985.
- 5.- "Molecular collision theory", M. S. Child, Academic Press, Inc., New York, 1974.
- 6.- "Understanding molecular simulation", D. Frenkel and B. Smit, Academic Press, 2002.
- 7.- "Chemical kinetics", K.J. Laidler, HarperRow, 1987.
- 8.- "Introduction to QM/MM simulations", Gerrit Groenhof in "Methods in Molecular Biology" (Clifton, N.J.) 924, 2013, pg. 43-66.

2. Metodologías docentes y tiempo de trabajo del estudiante

2.1. Presencialidad

	#horas
Porcentaje de actividades presenciales (mínimo 33% del total)	35
Porcentaje de actividades no presenciales	90

2.2. Relación de actividades formativas

Actividades presenciales	Nº horas
Clases teóricas en aula	35
Seminarios	
Clases prácticas en aula	
Prácticas clínicas	
Prácticas con medios informáticos	
Prácticas de campo	
Prácticas de laboratorio	
Prácticas externas y/o practicum	

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	3/4
Firmado por:	Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas			
Url de Verificación:		Página:	3/4	

Trabajos académicamente dirigidos	
Tutorías	
Actividades de evaluación	
Otras	

Lección Magistral: El profesor expondrá los contenidos del curso en sesiones presenciales, o, por video conferencia de dos horas basándose en los materiales docentes publicados en la plataforma Moodle.

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, y correo electrónico.

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

Seminarios online. Con posterioridad a las clases expositivas, se realizarán seminarios online sobre algunos temas y también para discutir los resultados obtenidos en los trabajos propuestos, las dudas sobre las metodologías empleadas, y supervisar la preparación de los informes elaborados por los estudiantes.

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.

3. Sistemas de evaluación y porcentaje en la calificación final

3.1. Convocatoria ordinaria

Los conocimientos adquiridos por el estudiante serán evaluados a lo largo de todo el curso, intentando que el estudiante avance de forma regular y constante en la asimilación de los contenidos de la asignatura.

La nota final de la asignatura se basará en los ejercicios, trabajos y discusión de los mismos que se irá realizando durante el curso. También se realizará un examen al final. La puntuación final se hará en base a los siguientes porcentajes:

- 80 % Realización de los trabajos requeridos
- 20 % Examen final

3.1.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Examen final (máximo 70% de la calificación final o el porcentaje que figure en la memoria)	20
Evaluación continua	80

3.2. Convocatoria extraordinaria

Se realizará un examen final único, de carácter teórico y práctico, que abarcará los contenidos de toda la asignatura. La puntuación se realizará en base a los siguientes porcentajes:

- 50 % Examen final,
- 50 % Realización de los trabajos requeridos

3.2.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Examen final (máximo 70% de la calificación final o el porcentaje que figure en la memoria)	50
Evaluación continua	50

4. Cronograma orientativo

Por favor, comprobar el horario oficial publicado en la página web del Máster.

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	4/4
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	4/4	



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE MADRID

31246 - ESTADOS EXCITADOS

Información de la asignatura

Código - Nombre: 31246 - ESTADOS EXCITADOS

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
762 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2021)

Centro: 104 - Facultad de Ciencias

Curso Académico: 2023/24

1. Detalles de la asignatura

1.1. Materia

Estados Excitados.

1.2. Carácter

Optativa

1.3. Nivel

Máster (MECES 3)

1.4. Curso

1

1.5. Semestre

Anual

1.6. Número de créditos ECTS

5.0

1.7. Idioma

English

1.8. Requisitos previos

No hay.

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	1/5
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	1/5	

1.9. Recomendaciones

No hay.

1.10. Requisitos mínimos de asistencia

La asistencia a las clases es obligatoria.

1.11. Coordinador/a de la asignatura

Javier Cerezo Bastida -Universidad Autónoma de Madrid.

<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.

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:

CT03 - El/la estudiante posee capacidad de análisis y síntesis de tal forma que pueda comprender, interpretar y evaluar la información relevante asumiendo con responsabilidad su propio aprendizaje o, en el futuro, la identificación de salidas profesionales y yacimientos de empleo.

ESPECÍFICAS:

CE04 - Comprende los fundamentos teóricos y prácticos de técnicas computacionales con las que puede analizar la estructura electrónica, morfológica y estructural de un compuesto e interpreta adecuadamente los resultados.

CE27 - Los estudiantes conocen los fundamentos de los métodos utilizados para el tratamiento de estados excitados y son capaces de manejar los programas de uso más frecuente para el tratamiento de estados excitados.

1.12.2. Resultados de aprendizaje

El curso pretende familiarizar a los estudiantes con el tratamiento de estados excitados, tanto rovibracionales como electrónicos. Al final del curso el estudiante conocerá los fundamentos de los métodos y será capaz de manejar los programas de uso más frecuente para el tratamiento de estados excitados.

1.12.3. Objetivos de la asignatura

-

1.13. Contenidos del programa

1. Funciones de energía potencial nuclear

- Aproximación de Born-Oppenheimer
- Curvas de energía potencial de moléculas diatómicas
- Superficies de energía potencial de moléculas poliatómicas

2. Interacción de la radiación y la materia

- Modelo clásico de la radiación electromagnética

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	2/5
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	2/5	

- Probabilidad de transición inducida por la radiación
3. Espectros rovibracionales:
- Moléculas diatómicas: niveles de energía y reglas de selección
 - Espectros rotacionales puros y rovibracionales en diatómicas.
 - Moléculas poliatómicas: vibraciones clásicas y vibraciones cuánticas.
 - Espectros rovibracionales en poliatómicas.
 - Relajación vibracional en líquidos: métodos experimentales y tratamientos teóricos
4. Conceptos básicos en Fotoquímica Molecular
- Absorción de luz: (Radiación electromagnética, la ley de Lambert-Beer, Espectros de absorción, principio de Franck-Condon, Momento dipolar de transición, Oscilador armónico clásico y su versión mecánico cuántica, Reglas de Selección, Transiciones electrónicas)
 - Desactivación de los estados excitados: (Transferencia de energía y electrónica, Diagramas de Jablonski, Relajación vibracional, Transiciones radiativas y no radiativas, principio Franck-Condon para transiciones no radiativas, Ley de la diferencia de energía, Escalas de tiempo y rendimientos cuánticos, Ley de oro de Fermi)
 - Superficies de energía potencial excitadas: (cruces entre superficies, caminos de reacción fotoquímicos, ejemplos).
5. Cálculos químico-cuánticos de estados excitados: Métodos multiconfiguracionales.
- *Correlación electrónica en moléculas.*
 - *Métodos de estructura electrónica para el cálculo de estados excitados. Métodos monoconfiguracionales vs multiconfiguracionales. Métodos CASSCF, RASSCF y más avanzados (DMRG, FCIQMC, HCI). Selección del espacio activo. Cálculos single state vs. state-average. average. Consideraciones a la hora de elegir un conjunto de funciones de base.*
 - *Introducción de correlación dinámica: el método CASPT2.*
 - *Método CASPT2 problemas y soluciones: estados intrusos, cruces evitados y mezcla Rydberg-valencia. El método Level shift y MS-CASPT2. Otras mejoras de CASPT2: IPEA, XDW. Comparativa de CASPT2 frente NEVPT2.*
 - *Ejemplos.*
6. Cálculos químico-cuánticos de estados excitados: aplicaciones de métodos TD-DFT.
- *Evaluación de superficies de energía potencial de estados excitados.*
 - *Cálculo de espectros electrónicos y transiciones no radiactivas.*
7. Simulaciones dinámicas: Propagación de paquetes de onda.
- Operador de evolución temporal, Propagación, Método de relajación, Método de filtrado. Interacción con un campo eléctrico. Funciones de correlación. Espectros y autofunciones. Espectroscopía bombeo-sonda y control.
8. Dinámicas ultrarrápidas con TD-DFT.
- Dinámica molecular ab initio: Dinámicas Born-Oppenheimer y Ehrenfest. Dinámicas no adiabáticas, *Tully's surface hopping*. Ejemplos de dinámicas moleculares ab initio no adiabáticas. Incorporación de efectos del entorno: campos electromagnéticos y disolvente.

1.14. Referencias de consulta

- A. Requena y J. Zúñiga, Espectroscopía (Pearson Education, Madrid, 2004).
- P.F. Bernath, Spectra of Atoms and Molecules (Oxford University Press, Nueva York, 1995).
- J. L. McHale, Molecular Spectroscopy (Prentice Hall, New Jersey, 1999).
- J. I. Steinfeld, Molecules and Radiation (The MIT Press, Cambridge, 1989).
- W. S. Struve, Fundamentals of Molecular Spectroscopy (Wiley, Nueva York, 1989).
- S. Svanberg, Atomic and Molecular Spectroscopy (Springer-Verlag, Berlín, 2001).
- J. M. Hollas, Modern Spectroscopy (Wiley, Chichester, 1996).
- I. N. Levine, Molecular Spectroscopy (Wiley, 1980)
- C.A. Ullrich, Time-Dependent Density-Functional Theory: Concepts and Applications (Oxford University Press, USA, 2012).
- D. Marx and J. Hutter, Ab Initio Molecular Dynamics: Basic Theory and Advanced Methods, 1st ed. (Cambridge University Press, Cambridge, 2009).
- D.J. Tannor, Introduction to Quantum Mechanics: A Time-Dependent Perspective (University Science Books, 2006).
- edited by M.A.L. Marques, C.A. Ullrich, F. Nogueira, A. Rubio, K. Burke, and E.K.U. Gross, Time-Dependent Density

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	3/5
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	3/5	

Functional Theory, 1st ed. (Springer, 2006).

- M.A.L. Marques and E.K.U. Gross, Annual Review of Physical Chemistry 55, 427-455 (2004).
- P.W. Brumer and M. Shapiro, Principles of the Quantum Control of Molecular Processes, illustrated ed. (Wiley-Interscience, 2003).
- L. Serrano-Andrés and M. Merchán, Spectroscopy: Applications in Encyclopedia of Computational Chemistry (John Wiley & Sons, Ltd, 2004).
- S.A. Rice and M. Zhao, Optical Control of Molecular Dynamics, 1st ed. (Wiley-Interscience, 2000).
- edited by B.O. Roos, Lecture Notes in Quantum Chemistry II: European Summer School in Quantum Chemistry, 1st ed. (Springer-Verlag, 1994).
- E.K.U. Gross, J.F. Dobson and M. Petersilka, in Density Functional Theory II, edited by R. Nalewajski (Springer Berlin / Heidelberg, 1996), pp. 81-172.
- N.J. Turro, Modern Molecular Photochemistry (University Science Books, Mill Valley, California, 1991).
- B.O. Roos, Ab initio methods in quantum chemistry II in Advances in Chemical Physics, edited by K. P. Lawley (John Wiley & Sons, Inc., 1987), pp. 399-445.
- edited by M. Olivucci, Computational Photochemistry (Elsevier, Amsterdam, 2005)

2. Metodologías docentes y tiempo de trabajo del estudiante

2.1. Presencialidad

	#horas
Porcentaje de actividades presenciales (mínimo 33% del total)	35
Porcentaje de actividades no presenciales	90

2.2. Relación de actividades formativas

Actividades presenciales	Nº horas
Clases teóricas en aula	35
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	
Actividades de evaluación	
Otras	

Lección Magistral: El profesor expondrá los contenidos del curso en sesiones presenciales de dos horas basándose en los materiales docentes publicados en la plataforma Moodle.

Docencia en red: Se utilizará las distintas herramientas que ofrece la plataforma moodle (<https://posgrado.uam.es>).
Publicación de contenidos de la asignatura, herramientas de trabajo en grupo: foros de discusión y wiki, correo electrónico.

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

Seminarios online: Con posterioridad a las clases expositivas, se realizarán seminarios online para discutir los resultados obtenidos en los trabajos propuestos, las dudas sobre las metodologías empleadas, y supervisar la preparación de los informes elaborados por los estudiantes.

3. Sistemas de evaluación y porcentaje en la calificación final

3.1. Convocatoria ordinaria

Los conocimientos adquiridos por el estudiante serán evaluados a lo largo de todo el curso, intentando que el estudiante avance de forma regular y constante en la asimilación de los contenidos de la asignatura.

La nota final de la asignatura se basará en los ejercicios, trabajos y discusión de los mismos que se irá realizando durante el curso. Dichos trabajos se puntuarán en base a los siguientes porcentajes:

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	4/5
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	4/5	

- 60 % Realización de un trabajo propuesto.
- 40 % Discusión de la materia durante las prácticas, incluyendo una pequeña prueba escrita (10%).

3.1.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Examen final (máximo 70% de la calificación final o el porcentaje que figure en la memoria)	10
Evaluación continua	90

3.2. Convocatoria extraordinaria

Se realizará un examen final único que será de carácter teórico y que abarcará los contenidos de toda la asignatura. La puntuación en la convocatoria extraordinaria se realizará en base a los siguientes porcentajes:

- 80 % la realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura.
- 20% el examen final.

3.2.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Examen final (máximo 70% de la calificación final o el porcentaje que figure en la memoria)	20
Evaluación continua	80

4. Cronograma orientativo

Por favor, comprobar el horario oficial publicado en la página web del Máster.

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	5/5
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	5/5	



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE MADRID

32523 - FUNDAMENTOS MATEMÁTICOS DE LA MECÁNICA CUÁNTICA

Información de la asignatura

Código - Nombre: 32523 - FUNDAMENTOS MATEMÁTICOS DE LA MECÁNICA CUÁNTICA

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

651 - Máster Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelización Computacional

666 - Programa de Doctorado 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

762 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2021)

Centro: 104 - Facultad de Ciencias

Curso Académico: 2023/24

1. Detalles de la asignatura

1.1. Materia

Fundamentos Matemáticos de la Mecánica Cuántica.

1.2. Carácter

616 - Obligatoria

762 - Obligatoria

666 - Complementos de Formación

651 - Obligatoria

748 - Obligatoria

751 - Obligatoria

1.3. Nivel

616 - Máster (MECES 3)

666 - Doctorado (MECES 4)

762 - Máster (MECES 3)

651 - Máster (MECES 3)

748 - Máster (MECES 3)

751 - Máster (MECES 3)

1.4. Curso

751 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional Europeo: 1

666 - Programa de Doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional: 99

651 - Máster Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelización Computacional: 1

748 - Máster Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelización Computacional: 1

762 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2021): 1

616 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2013): 1

1.5. Semestre

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	1/5
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	1/5	

A anual

1.6. Número de créditos ECTS

5.0

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/a de la asignatura

Antonio Picón - Universidad Autónoma de Madrid.

<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.

CG02 - Los estudiantes son capaces de resolver problemas y tomar decisiones de cualquier índole bajo el compromiso con la defensa y práctica de las políticas de igualdad.

CG03 - Los estudiantes son capaces de trabajar en equipo tanto a nivel multidisciplinar como con sus propios pares respetando el principio de igualdad de hombre y mujeres.

TRANSVERSALES

CT01 - El/la estudiante es capaz de adaptarse a diferentes entornos culturales demostrando que responde al cambio con flexibilidad.

CT02 - El/la estudiante es organizado en el trabajo demostrando que sabe gestionar el tiempo y los recursos de que dispone.

ESPECÍFICAS

CE01 - Los estudiantes demuestran su conocimiento y comprensión de los hechos aplicando conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química Teórica y Modelización Computacional.

CE04 - Comprende los fundamentos teóricos y prácticos de técnicas computacionales con las que puede analizar la estructura

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	2/5
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	2/5	

electrónica, morfológica y estructural de un compuesto e interpreta adecuadamente los resultados.

CE12 - Está familiarizado con los postulados fundamentales de la Mecánica Cuántica necesarios para un buen entendimiento de los métodos más comunes utilizados en química cuántica.

CE17 - Los estudiantes comprenden y manejan las herramientas matemáticas requeridas para el desarrollo de la Química Teórica en sus aspectos fundamentales y sus aplicaciones.

1.12.2. Resultados de aprendizaje

Comprensión y manejo de las herramientas matemáticas requeridas para el desarrollo de la Mecánica Cuántica en sus aspectos fundamentales y sus aplicaciones.

1.12.3. Objetivos de la asignatura

-

1.13. Contenidos del programa

- 1- Introducción. Solución de la ecuación de Schrödinger para casos sencillos.
- 2- Álgebra básica.
- 3- Espacios funcionales.
- 4- Representaciones discretas. Cambios de base.
- 5- Representaciones de posiciones y de momentos.
- 6 -Métodos aproximados en Química Cuántica: Principio Variacional y Teoría de Perturbaciones independiente del tiempo.
- 7 -Partículas independientes e idénticas.
- 8- Estados puros y estados mezcla.
- 9- Operadores de densidad.
- 10- Operadores y matrices de densidad reducidos. Espinorbitales naturales
- 11- Teoremas principales de la Mecánica Cuántica.
- 12- Postulados de la mecánica cuántica.
- 13- Observables compatibles e incompatibles.
- 14- Sistemas compuestos. Correlación y entrelazamiento.
- 15- Imágenes de evolución temporal.
- 16- Teoría de perturbaciones dependientes del tiempo.
- 17- Momento Angular, spin.
- 18- Composición de momentos angulares
- 19- Formalismo de segunda cuantización.

1.14. Referencias de consulta

a) Nivel básico

Quantum Chemistry (6th edition 2008). Ira N Levine. Prentice Hall.

Student Solutions Manual for Quantum Chemistry. Ira N Levine.

Molecular Quantum Mechanics (5th Edition 2010). Peter W. Atkins , Ronald S. Friedman. Oxford University Press.

Quantum Chemistry (2nd edition 2008). Donald A. McQuarrie. University Science Books.

Problems and Solutions for McQuarrie's Quantum Chemistry. Helen O. Leung, Mark Marshall.

b) Nivel Recomendado

Quantum Mechanics, Volume 1 and 2. Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu, Frank Laloe. Wiley-Interscience (2005).

Quantum Mechanics (2nd Edition, 2000). B.H. Bransden, C.J. Joachain. Benjamin Cummings.

Problems and Solutions in Quantum Chemistry and Physics. Charles S. Johnson Jr., Lee G. Pedersen. Dover Publications (1987).

Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory. Attila Szabo, Neil S. Ostlund. Dover Publications (1996).

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	3/5
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	3/5	

c) Nivel avanzado

Quantum Mechanics Non-Relativistic Theory, Third Edition: Volume 3. L. D. Landau, L. M. Lifshitz.

Quantum Mechanics (2 Volumes in 1). Albert Messiah.

Quantum Mechanics (2 volumes). Alberto Galindo, Pedro Pascual. Springer (1991).

2. Metodologías docentes y tiempo de trabajo del estudiante

2.1. Presencialidad

	# horas
Porcentaje de actividades presenciales (mínimo 33% del total)	43
Porcentaje de actividades no presenciales	82

2.2. Relación de actividades formativas

Actividades presenciales	Nº horas
Clases teóricas en aula	31
Seminarios	12
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 de dos horas basándose en los materiales docentes publicados en la plataforma Moodle.

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 online. Con posterioridad a las clases expositivas, se realizarán seminarios online para discutir los resultados obtenidos en los trabajos propuestos, las dudas sobre las metodologías empleadas, y supervisar la preparación de los informes elaborados por los estudiantes.

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

Los conocimientos adquiridos por el estudiante serán evaluados a lo largo de todo el curso, intentando que el estudiante avance de forma regular y constante en la asimilación de los contenidos de la asignatura.

La nota final de la asignatura se basará en

- 60% Entrega de una hoja de ejercicios propuestos.
- 40% Informes sobre los ejercicios hechos en el aula, tutorías y seminarios.

3.1.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Examen final (máximo 70% de la calificación final o el porcentaje que figure en la memoria)	60

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	4/5
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	4/5	

3.2. Convocatoria extraordinaria

El estudiante tendrá que presentar los trabajos que no haya realizado durante el curso o que haya realizado de forma incorrecta. La puntuación en la convocatoria extraordinaria se realizará en base a los siguientes porcentajes:

- 100% ejercicios

3.2.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Examen final (máximo 70% de la calificación final o el porcentaje que figure en la memoria)	100
Evaluación continua	

4. Cronograma orientativo

Por favor, comprobar el horario oficial publicado en la página web del Máster.

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	5/5
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	5/5	



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE MADRID

32531 - LABORATORIO DE QUÍMICA TEÓRICA APLICADA

Información de la asignatura

Código - Nombre: 32531 - LABORATORIO DE QUÍMICA TEÓRICA APLICADA

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
762 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2021)

Centro: 104 - Facultad de Ciencias

Curso Académico: 2023/24

1. Detalles de la asignatura

1.1. Materia

Laboratorio de Química Teórica Aplicada.

1.2. Carácter

Optativa

1.3. Nivel

Máster (MECES 3)

1.4. Curso

1

1.5. Semestre

616-Anual o Primer semestre
762-Anual o Primer semestre
651-Anual o Primer semestre
748-Anual o Primer semestre
621-Anual
751-Anual o Primer semestre

1.6. Número de créditos ECTS

5.0

1.7. Idioma

Inglés

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	1/4
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	1/4	

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/a de la asignatura

Lara Martínez Fernández - Universidad Autónoma de Madrid.

<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.

CG02 - Los estudiantes son capaces de resolver problemas y tomar decisiones de cualquier índole bajo el compromiso con la defensa y práctica de las políticas de igualdad.

TRANSVERSALES:

CT02 - El/la estudiante es organizado en el trabajo demostrando que sabe gestionar el tiempo y los recursos de que dispone.

CT03 - El/la estudiante posee capacidad de análisis y síntesis de tal forma que pueda comprender, interpretar y evaluar la información relevante asumiendo con responsabilidad su propio aprendizaje o, en el futuro, la identificación de salidas profesionales y yacimientos de empleo.

1.12.2. Resultados de aprendizaje

1. Introducción a la investigación científica: Búsquedas de bibliografía y presentación de trabajos científicos.
2. Herramientas básicas informáticas: acceso a centros de cálculo, herramientas de visualización, herramientas de representación gráfica y herramientas de programación.
3. Toma de contacto con programas de cálculo dirigidos al estudio del estado fundamental y estados excitados.
4. Afianzar los conceptos de función de onda multiconfiguracional y correlación estática vs. correlación dinámica.
5. Toma de contacto con programas de cálculo dirigidos al estudio de cálculos mecano-cuánticos.
6. Sistemas periódicos: Conceptos físicos básicos
7. Toma de contacto con programas de cálculo dirigidos al estudio de sistemas periódicos.
8. Localización y análisis de información relevante acerca de la función de onda y otras propiedades moleculares a partir de la salida de estos programas.
9. Familiarización con programas de visualización de resultados obtenidos con los programas de cálculo mencionados anteriormente.

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	2/4
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	2/4	

1.12.3. Objetivos de la asignatura

-

1.13. Contenidos del programa

1. Breve introducción a la programación.
2. Programas habituales de cálculo en Química Cuántica: Gaussian y Openmolcas.
3. Programas de cálculo de sistemas periódicos: Quantum Espresso.
4. Programas de visualización de resultados: GView, Molden.

1.14. Referencias de consulta

1. Consulta de documentación actualizada en línea en lenguajes de programación y aplicaciones: Python: www.python.org
2. J. B. Foreman y E. Frisch, Exploring chemistry with Electronic Structure Methods. 2nd Edition. Gaussian, Inc. Pittsburgh, 1996.
3. MOLCAS v. 7.8 Users' manual, Lund University, 2012.
4. Mopac manual: <http://openmopac.net/manual/>
5. L. Sun and W. Hase, Born-Oppenheimer Direct Dynamics Classical Trajectory Simulations.
6. Charles Kittel Introduction to solid state physics
7. Neil W. Ashcroft and N. David Mermin Solid state physics
8. Gaussian manual www.gaussian.com

2. Metodologías docentes y tiempo de trabajo del estudiante

2.1. Presencialidad

	#horas
Porcentaje de actividades presenciales (mínimo 33% del total)	50
Porcentaje de actividades no presenciales	75

2.2. Relación de actividades formativas

Actividades presenciales	Nº horas
Clases teóricas en aula	
Seminarios	
Clases prácticas en aula	40
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	

Lección Magistral: El profesor expondrá los contenidos del curso en sesiones presenciales, o, por video conferencia de dos horas basándose en los materiales docentes publicados en la plataforma Moodle.

Clases en aula de informática. La docencia se impartirá en un aula de informática. Las clases, en sesiones de dos a cuatro 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.

Docencia en red. Se utilizará las distintas herramientas que ofrece la plataforma moodle (<https://posgrado.uam.es>).
Publicación de contenidos de la asignatura, herramientas de trabajo en grupo: foros de discusión y wiki, correo electrónico

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

3. Sistemas de evaluación y porcentaje en la calificación final

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	3/4
Firmado por:	Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas			
Url de Verificación:		Página:	3/4	

3.1. Convocatoria ordinaria

Los conocimientos adquiridos por el estudiante serán evaluados a lo largo de todo el curso, intentando que el estudiante avance de forma regular y constante en la asimilación de los contenidos de la asignatura.

La nota final de la asignatura se basará en la evaluación de un proyecto de investigación (que se propondrá y dirigirá durante las clases prácticas) englobando los conocimientos adquiridos a lo largo de la asignatura. También se evaluará la participación en las clases prácticas a lo largo del curso. Dichos trabajos se puntuarán en base a los siguientes porcentajes:

- 60% Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura. De este porcentaje, el 40% corresponde con la realización del informe crítico y el 20% con las actividades a evaluar en el aula que podrá ser en forma de exposición oral del informe realizado.
- 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	%
Examen final (máximo 70% de la calificación final o el porcentaje que figure en la memoria)	60
Evaluación continua	40

3.2. Convocatoria extraordinaria

Se realizará un examen final único que será de carácter teórico y que abarcará los contenidos de toda la asignatura. La puntuación en la convocatoria extraordinaria se realizará en base a los siguientes porcentajes:

- 60% Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura,
- 40 % Actividades a evaluar en el aula.

3.2.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Examen final (máximo 70% de la calificación final o el porcentaje que figure en la memoria)	60
Evaluación continua	40

4. Cronograma orientativo

Bloque temático	Clase
Introducción a la investigación científica	1
Herramientas informáticas	2 y 12
Programas de cálculo en Química Cuántica: Gaussian, Mopac	3
Programas de cálculo en Química Cuántica: Molcas	4, 5 y 6
Programas de cálculo de dinámica: Venus	7 y 8
Programas de cálculo de sistemas periódicos: VASP	9, 10 y 11

Por favor, comprobar el horario oficial publicado en la página web del Máster.

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	4/4
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	4/4	



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE MADRID

32532 - LÁSERES

Información de la asignatura

Código - Nombre: 32532 - LÁSERES

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
762 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2021)

Centro: 104 - Facultad de Ciencias

Curso Académico: 2023/24

1. Detalles de la asignatura

1.1. Materia

Lasers

1.2. Carácter

Optativa

1.3. Nivel

Máster (MECES 3)

1.4. Curso

1

1.5. Semestre

Anual

1.6. Número de créditos ECTS

5.0

1.7. Idioma

English

1.8. Requisitos previos

No hay.

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	1/4
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	1/4	

1.9. Recomendaciones

No hay.

1.10. Requisitos mínimos de asistencia

La asistencia a las clases es obligatoria.

1.11. Coordinador/a de la asignatura

Alicia Palacios Cañas

<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.

TRANSVERSALES:

CT03 - El/la estudiante posee capacidad de análisis y síntesis de tal forma que pueda comprender, interpretar y evaluar la información relevante asumiendo con responsabilidad su propio aprendizaje o, en el futuro, la identificación de salidas profesionales y yacimientos de empleo.

CT04 - El/la estudiante tiene capacidad de generar nuevas ideas a partir de sus propias decisiones.

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.

CE24 - Conoce los fundamentos de los láseres y está familiarizado con la resolución de problemas dependientes del tiempo y el tratamiento de estados del continuo.

1.12.2. Resultados de aprendizaje

Conocer los fundamentos de la luz láser y sus principales aplicaciones en química cuántica y física atómica y molecular. Familiarizarse con la resolución de problemas dependientes del tiempo y el tratamiento de estados del continuo.

1.12.3. Objetivos de la asignatura

-

1.13. Contenidos del programa

1. Introducción. ¿Qué es un láser? ¿Para qué se usa? Características de la luz láser.
2. Propiedades del láser. Niveles de energía. Formación de líneas espectrales: coeficientes de Einstein. Emisión espontánea y estimulada. Inversión de población y saturación. Ensanchamiento de líneas espectrales. Ejemplos prácticos de láseres.
3. Láseres de onda continua (cw) y láseres pulsados. Generación de láseres de onda continua. Reducción del ancho de banda. Formación de láseres pulsados por Q switching y por modelocking.
4. Interacción láser-materia. Descripción clásica y cuántica. Procesos multifotónicos y efecto túnel. Modelo de los tres pasos. Generación de armónicos altos. Pulsos láseres de attosegundos y trenes de pulsos de attosegundos.
5. Efectos de campo intenso. Frecuencias de Rabi. Desplazamiento Stark. Ionización por encima del umbral (ATI). Estados vestidos. Estados de Volkov y de Floquet. Aproximación de campo intenso.
6. Tratamientos teóricos. Bases de estados en el continuo electrónico: Bsplines. Integración directa de la ecuación de

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	2/4
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	2/4	

Schrödinger dependiente del tiempo. Métodos híbridos.

7. Espectroscopía resuelta en el tiempo. Esquemas de pump-probe con pulsos láser. Usos en femtoquímica y attofísica. Attoquímica.

1.14. Referencias de consulta

1. Introduction to Laser Technology. B. Hitz, J. J. Swing and J. Hecht. IEEE Press, New York, 2001
2. Introduction to Quantum Optics. G. Grynberg, A. Aspect and C. Fabre. Cambridge University Press. Cambridge, 2010.
3. Principles of Lasers. O. Svelto. Plenum Press, New York. 1998.
4. Laser Fundamentals. W. T. Silfvast. Cambridge University Press, Cambridge, 2004.
5. Quantum Optics. M. O. Scully. Cambridge University Press. Cambridge, 1997.
6. Lasers. A. E. Siegman. University Science Books. 1986.
7. Bachau H, Cormier E, Decleva P, Hansen J E and Martín F 2001 Rep. Prog. Phys. 64 1815.
8. Martín F 1999 J. Phys. B (Topical Review) 32 R197

2. Metodologías docentes y tiempo de trabajo del estudiante

2.1. Presencialidad

	#horas
Porcentaje de actividades presenciales (mínimo 33% del total)	50
Porcentaje de actividades no presenciales	75

2.2. Relación de actividades formativas

Actividades presenciales	Nº horas
Clases teóricas en aula	34
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	6
Actividades de evaluación	
Otras	

Lección Magistral: El profesor expondrá los contenidos del curso en sesiones presenciales, o, por video conferencia de dos horas basándose en los materiales docentes publicados en la plataforma Moodle.

Docencia en red. Se utilizará las distintas herramientas que ofrece la plataforma Moodle (<https://posgrado.uam.es>).
Publicación de contenidos de la asignatura, herramientas de trabajo en grupo: foros de discusión y wiki, correo electrónico

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

3. Sistemas de evaluación y porcentaje en la calificación final

3.1. Convocatoria ordinaria

Los conocimientos adquiridos por el estudiante serán evaluados a lo largo de todo el curso, intentando que el estudiante avance de forma regular y constante en la asimilación de los contenidos de la asignatura.

La nota final de la asignatura se basará en los ejercicios, trabajos y discusión de los mismos que se irá realizando durante el curso. Dichos trabajos se puntuarán en base a los siguientes porcentajes:

- 70% Examen al final del curso
- 30% Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura.

3.1.1. Relación actividades de evaluación

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	3/4
Firmado por:	Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas			
Url de Verificación:		Página:	3/4	

Actividad de evaluación	%
Examen final (máximo 70% de la calificación final o el porcentaje que figure en la memoria)	70
Evaluación continua	30

3.2. Convocatoria extraordinaria

Se realizará un examen final único que será de carácter teórico y que abarcará los contenidos de toda la asignatura. La puntuación en la convocatoria extraordinaria se realizará en base a los siguientes porcentajes:

- 70% el examen final,
- 30% la realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura.

3.2.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Examen final (máximo 70% de la calificación final o el porcentaje que figure en la memoria)	70
Evaluación continua	30

4. Cronograma orientativo

Por favor, comprobar el horario oficial publicado en la página web del Máster.

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	4/4
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	4/4	



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE MADRID

32530 - LINUX Y LINUX DE GESTIÓN

Información de la asignatura

Código - Nombre: 32530 - LINUX Y LINUX DE GESTIÓN

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
762 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2021)

Centro: 104 - Facultad de Ciencias

Curso Académico: 2023/24

1. Detalles de la asignatura

1.1. Materia

Linux y Linux de gestión.

1.2. Carácter

Optativa

1.3. Nivel

Máster (MECES 3)

1.4. Curso

1

1.5. Semestre

616-Anual o Primer semestre
762-Anual o Primer semestre
651-Anual o Primer semestre
748-Anual o Primer semestre
621-Anual
751-Anual o Primer semestre

1.6. Número de créditos ECTS

5.0

1.7. Idioma

English

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	1/4
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	1/4	

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/a de la asignatura

Pablo Sanz Mercado - Universidad Autónoma de Madrid.

<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.

CG02 - Los estudiantes son capaces de resolver problemas y tomar decisiones de cualquier índole bajo el compromiso con la defensa y práctica de las políticas de igualdad.

TRANSVERSALES:

CT02 - El/la estudiante es organizado en el trabajo demostrando que sabe gestionar el tiempo y los recursos de que dispone.

CT03 - El/la estudiante posee capacidad de análisis y síntesis de tal forma que pueda comprender, interpretar y evaluar la información relevante asumiendo con responsabilidad su propio aprendizaje o, en el futuro, la identificación de salidas profesionales y yacimientos de empleo.

1.12.2. Resultados de aprendizaje

El objetivo es conseguir un conocimiento no solo a nivel de usuario/a sino a nivel de administrador/a de sistemas complejos de cálculo basados en GNU/Linux. Esto incluye las operaciones cotidianas, seguridad, y también programación de shell scripts para automatizar tareas con el objetivo de mantener un sistema de cálculo de complejidad media operativo con alta disponibilidad.

1.12.3. Objetivos de la asignatura

-

1.13. Contenidos del programa

- Hardware
- Sistemas operativos GNU/Linux.
- Diferentes variantes.
- Comandos fundamentales.
- Editor vi.
- Sistemas de archivos.
- Administración de sistemas.

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	2/4
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	2/4	

- Programación en shell scripts.

1.14. Referencias de consulta

- Principios y administración de Linux. Pablo Sanz Mercado, Alberto Luna Fernández. UAM Ediciones, 2009.
- Seguridad en Linux: Una guía práctica. Pablo Sanz Mercado. Colección cuadernos de apoyo, UAM Ediciones, 2008.
- Programación de Shell scripts. Alberto Luna Fernández, Pablo Sanz Mercado. UAM ediciones, 2011.
- Bash cookbook. Carl Albing, J.P. Vossen & Cameron Newwham. O'Reilly, 2007.
- Unix system administration handbook. Evi Nemeth, Garth Snyder, Scott Seebass, Trent R. Hein. Ed. Prentice Hall, 2001.
- Unix Power tools. Jerry Peek, Tim. Ed. O'Reilly, Mike Loukides. O'Reilly 1997.

2. Metodologías docentes y tiempo de trabajo del estudiante

2.1. Presencialidad

	#horas
Porcentaje de actividades presenciales (mínimo 33% del total)	50
Porcentaje de actividades no presenciales	75

2.2. Relación de actividades formativas

Actividades presenciales	Nº horas
Clases teóricas en aula	
Seminarios	
Clases prácticas en aula	
Prácticas clínicas	
Prácticas con medios informáticos	40
Prácticas de campo	
Prácticas de laboratorio	
Prácticas externas y/o practicum	
Trabajos académicamente dirigidos	
Tutorías	10
Actividades de evaluación	
Otras	

Lección Magistral: El profesor llevará a cabo clases sobre contenidos teóricos del curso durante unas dos horas aproximadamente. Las presentaciones se basarán en diferentes materiales disponibles en la plataforma Moodle.

Clases en aula de informática: La docencia se impartirá en un aula de informática. Las clases, en sesiones de dos a cinco 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.

Docencia en red: Se utilizarán 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, correo electrónico

Informes o memorias escritas: Orientación y supervisión en la preparación de informes o memorias escritas.

3. Sistemas de evaluación y porcentaje en la calificación final

3.1. Convocatoria ordinaria

Los conocimientos adquiridos por el estudiante serán evaluados a lo largo de todo el curso, intentando que el estudiante avance de forma regular y constante en la asimilación de los contenidos de la asignatura.

La nota final de la asignatura se basará en los ejercicios, trabajos y discusión de los mismos que se irá realizando durante el curso. Dichos trabajos se puntuarán en base a los siguientes porcentajes:

- 100 % Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura,

3.1.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
-------------------------	---

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	3/4
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	3/4	

Examen final (máximo 70% de la calificación final o el porcentaje que figure en la memoria)	
Evaluación continua	

3.2. Convocatoria extraordinaria

Se realizará un examen final único que será de carácter teórico y que abarcará los contenidos de toda la asignatura. La puntuación en la convocatoria extraordinaria se realizará en base a los siguientes porcentajes:

- 70% el examen final,
- 30 % la realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura.

3.2.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Examen final (máximo 70% de la calificación final o el porcentaje que figure en la memoria)	70
Evaluación continua	30

4. Cronograma orientativo

Por favor, comprobar el horario oficial publicado en la página web del Máster.

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	4/4
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	4/4	



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE MADRID

32524 - MECÁNICA ESTADÍSTICA Y APLICACIONES EN SIMULACIÓN

Información de la asignatura

Código - Nombre: 32524 - MECÁNICA ESTADÍSTICA Y APLICACIONES EN SIMULACIÓN

Titulación: 616 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2013)
651 - Máster Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelización Computacional
666 - Programa de Doctorado 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
762 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2021)

Centro: 104 - Facultad de Ciencias

Curso Académico: 2023/24

1. Detalles de la asignatura

1.1. Materia

Mecánica Estadística y Aplicaciones en Simulación.

1.2. Carácter

616 - Obligatoria
762 - Obligatoria
666 - Complementos de Formación
651 - Obligatoria
748 - Obligatoria
751 - Obligatoria

1.3. Nivel

616 - Máster (MECES 3)
666 - Doctorado (MECES 4)
762 - Máster (MECES 3)
651 - Máster (MECES 3)
748 - Máster (MECES 3)
751 - Máster (MECES 3)

1.4. Curso

751 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional Europeo: 1
666 - Programa de Doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional: 99
651 - Máster Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelización Computacional: 1
748 - Máster Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelización Computacional: 1
762 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2021): 1
616 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2013): 1

1.5. Semestre

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	1/5
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	1/5	

616-Anual o Primer semestre
666-Anual o Primer semestre
762-Anual o Primer semestre
651-Anual o Primer semestre
748-Anual o Primer semestre
621-Anual
751-Anual o Primer semestre

1.6. Número de créditos ECTS

5.0

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/a de la asignatura

Ramón Sayós Ortega - Universidad de Barcelona

<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.

CG02 - Los estudiantes son capaces de resolver problemas y tomar decisiones de cualquier índole bajo el compromiso con la defensa y práctica de las políticas de igualdad.

TRANSVERSALES:

CT01 - El/la estudiante es capaz de adaptarse a diferentes entornos culturales demostrando que responde al cambio con flexibilidad.

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.

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	2/5
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	2/5	

CE04 - Comprende los fundamentos teóricos y prácticos de técnicas computacionales con las que puede analizar la estructura electrónica, morfológica y estructural de un compuesto e interpreta adecuadamente los resultados.

CE09 - El/la estudiante comprende la base de la Mecánica Estadística formulada a partir de las colectividades.

CE10 - Sabe calcular funciones de partición y aplica estadística cuántica y clásica a los sistemas ideales de interés en Química.

1.12.2. Resultados de aprendizaje

El curso está organizado en dos partes bien diferenciadas. La primera parte se dedica al estudio de los fundamentos de la Mecánica Estadística y la segunda parte se centra en las aplicaciones en simulación.

En la parte correspondiente a la Mecánica Estadística se busca que los alumnos comprendan la base de la Mecánica Estadística formulada a partir de las colectividades. El alumno debe entender las características de los colectivos más importantes (microcanónico, canónico y grancanónico), y saber elegir el más conveniente según sea el sistema químico que se desee estudiar. También debe entender las diferencias entre las estadísticas cuánticas de Fermi-Dirac y de Bose-Einstein, así como las situaciones en las que estas conducen al límite clásico. El alumno debe saber calcular funciones de partición y aplicar las estadísticas cuánticas y la clásica a los sistemas ideales de interés en Química. Tendrán que comprender las diferencias entre sistemas reales e ideales, analizando las características de gases reales y fases condensadas. Además se abordará el estudio mecano estadístico de sistemas de no equilibrio. Por último y dada la dificultad de encontrar resultados analíticos para muchos problemas, se analizarán los métodos de simulación con especial atención al método de MonteCarlo que permite obtener soluciones numéricas en sistemas y situaciones complejas.

Como aplicaciones los alumnos calcularán, haciendo uso de la información obtenida desde primeros principios mediante programas de cálculo de Química Cuántica (p.ej., GAMESS, GAUSSIAN,..), las funciones de partición y las correcciones entálpicas y entrópicas a diferencias de energías libres en distintas situaciones de interés químico (p.ej., constantes de equilibrio termodinámico de una reacción en fase gas). Además, en otras aplicaciones se determinarán diferentes propiedades macroscópicas usando simulaciones mediante Dinámica Molecular o métodos Monte Carlo, empleando los campos de fuerza apropiados para describir las interacciones moleculares (p.ej. TraPPE, GROMOS,..). Ejemplos de algunas de las aplicaciones a realizar: 1) cálculo de una tensión superficial líquido-vapor (p.ej., etanol), 2) cálculo de una tensión interfacial líquido-líquido (p.ej., dodecano/agua), 3) cálculo de un coeficiente de difusión en una mezcla de gases (p.ej., N₂ y O₂ en el aire), 4) cálculo de una isoterma de adsorción gas/sólido absorbente (p.ej., CO₂ sobre una zeolita).

1.12.3. Objetivos de la asignatura

-

1.13. Contenidos del programa

1- Mecánica Estadística

- Colectivos y postulados de la mecánica estadística.
- Colectivos microcanónico, canónico y grancanónico.
- Estadísticas de Fermi-Dirac, Bose-Einstein y Boltzmann.
- Mecánica estadística clásica.
- Aplicaciones a sistemas ideales: gases ideales, gas ideal de fotones, fonones, electrones en metales.
- Sistemas de partículas que interactúan: gases reales diluidos, segundo coeficiente del virial, ecuación de van der Waals.
- Mecánica estadística en sistemas de no equilibrio.
- Simulaciones de MonteCarlo.

2- Aplicaciones

- Cálculo de funciones de partición moleculares y propiedades macroscópicas para una reacción en fase gas (ΔU , ΔS , ΔG , K ,...) a varias temperaturas.
- Cálculo de una tensión superficial líquido-vapor.
- Cálculo de una tensión interfacial líquido-líquido.
- Cálculo de una isoterma de adsorción tipo gas/sólido absorbente.

1.14. Referencias de consulta

Theoretical and Computational Chemistry: Foundations, Methods and Techniques. J. Andrés y J. Bertrán. Eds. Publ. Univ. Jaime I (Castellón) 2007

Chandler, D., "Introduction to Modern Statistical Mechanics", (Oxford University Press, London, 1986)

Hill, T. L., "An Introduction to Statistical Thermodynamics" (Dover, New York) 1986 McQuarrie, D. A., "Statistical Mechanics", (Harper and Row, New York) 1976

Toda, M., Kubo, R., Saito, N., "Statistical Physics I, (Springer-Verlag, Heidelberg) 1992

Frenkel, D, Smit, B., "Understanding Molecular Simulation" (Academic Press, San Diego), 2002

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	3/5
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	3/5	

2. Metodologías docentes y tiempo de trabajo del estudiante

2.1. Presencialidad

	#horas
Porcentaje de actividades presenciales (mínimo 33% del total)	35
Porcentaje de actividades no presenciales	90

2.2. Relación de actividades formativas

Actividades presenciales	Nº horas
Clases teóricas en aula	25
Seminarios	
Clases prácticas en aula	
Prácticas clínicas	
Prácticas con medios informáticos	10
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, o, por video conferencia de dos horas basándose en los materiales docentes publicados en la plataforma Moodle.

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. Con posterioridad a las clases expositivas, se realizarán seminarios para abordar la aplicación de los conceptos teóricos a la resolución de cuestiones y problemas relacionados con la materia así como para discutir las dudas sobre las metodologías empleadas y supervisar 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.

Laboratorio computacional. En varias sesiones prácticas los alumnos harán cálculos sobre diferentes propiedades macroscópicas de interés químico, aplicando los conocimientos teóricos de Mecánica Estadística previamente explicados..

3. Sistemas de evaluación y porcentaje en la calificación final

3.1. Convocatoria ordinaria

La nota final vendrá dada por la realización de unos ejercicios, un test y un informe sobre las prácticas. Los porcentajes de este criterio estarán divididos en:

-60% corresponderá a la realización de ejercicios y de un test.

-40% informe que se discutirá en tutorías y/o seminarios sobre las prácticas realizadas en la asignatura.

3.1.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Examen final (máximo 70% de la calificación final o el porcentaje que figure en la memoria)	60
Evaluación continua	40

3.2. Convocatoria extraordinaria

Se realizará un examen final único que será de carácter teórico y práctico, y que abarcará los contenidos de toda la asignatura. La parte práctica constará de un trabajo individual que tiene que realizar el estudiante con los programas utilizados a lo largo del curso. La puntuación en la convocatoria extraordinaria se realizará en base a los siguientes porcentajes:

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	4/5
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	4/5	

- 70% Examen final,
- 30 % realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura.

3.2.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Examen final (máximo 70% de la calificación final o el porcentaje que figure en la memoria)	70
Evaluación continua	30

4. Cronograma orientativo

Por favor, comprobar el horario oficial publicado en la página web del Máster.

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	5/5
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	5/5	



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE MADRID

32527 - MÉTODOS DE LA QUÍMICA TEÓRICA I

Información de la asignatura

Código - Nombre: 32527 - MÉTODOS DE LA QUÍMICA TEÓRICA I

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

651 - Máster Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelización Computacional

666 - Programa de Doctorado 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

762 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2021)

Centro: 104 - Facultad de Ciencias

Curso Académico: 2023/24

1. Detalles de la asignatura

1.1. Materia

Métodos de la Química Teórica I.

1.2. Carácter

616 - Obligatoria

762 - Obligatoria

666 - Complementos de Formación

651 - Obligatoria

748 - Obligatoria

751 - Obligatoria

1.3. Nivel

616 - Máster (MECES 3)

666 - Doctorado (MECES 4)

762 - Máster (MECES 3)

651 - Máster (MECES 3)

748 - Máster (MECES 3)

751 - Máster (MECES 3)

1.4. Curso

751 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional Europeo: 1

666 - Programa de Doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional: 99

651 - Máster Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelización Computacional: 1

748 - Máster Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelización Computacional: 1

762 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2021): 1

616 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2013): 1

1.5. Semestre

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	1/4
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	1/4	

Anual

1.6. Número de créditos ECTS

5.0

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/a de la asignatura

Angelo Giussani - Universidad de Valencia.

<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.

CG02 - Los estudiantes son capaces de resolver problemas y tomar decisiones de cualquier índole bajo el compromiso con la defensa y práctica de las políticas de igualdad.

TRANSVERSALES:

CT01 - El/la estudiante es capaz de adaptarse a diferentes entornos culturales demostrando que responde al cambio con flexibilidad.

ESPECÍFICAS:

CE01 - Los estudiantes demuestran su conocimiento y comprensión de los hechos aplicando conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química Teórica y Modelización Computacional.

CE04 - Comprende los fundamentos teóricos y prácticos de técnicas computacionales con las que puede analizar la estructura electrónica, morfológica y estructural de un compuesto e interpreta adecuadamente los resultados.

CE15 - Entiende los principios básicos de las metodologías "ab initio" y Teoría de los Funcionales de la Densidad.

CE16 - El/la estudiante es capaz de discernir entre los diferentes métodos existentes y cómo seleccionar el más adecuado para cada problema.

1.12.2. Resultados de aprendizaje

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	2/4
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	2/4	

Después de cursar la asignatura los alumnos deberán estar en capacidad de:

- Comprender los fundamentos teóricos y prácticos de técnicas computacionales con las que puede analizar la estructura electrónica, morfológica y estructural de un compuesto e interpretar adecuadamente los resultados.
- Entender los principios básicos de las metodologías "ab initio" y Teoría de los Funcionales de la Densidad.
- Discernir entre los diferentes métodos existentes y cómo seleccionar el más adecuado para cada problema.
- Demostrar su conocimiento y comprensión de los hechos aplicando conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química Teórica y Modelización Computacional.

1.12.3. Objetivos de la asignatura

-

1.13. Contenidos del programa

1. Métodos Ab initio:

- Método de Hartree-Fock: RHF y UHF.
- Funciones de base.
- Visión general de métodos variacionales basados en función de onda: interacción de configuraciones y métodos multiconfiguracionales.
- Teoría de perturbaciones Moller-Plesset.
- Introducción a los métodos Coupled Cluster.
-

2. Teoría del Funcional de la Densidad:

- Conceptos preliminares. Teoremas de Hohenberg-Kohn.
- Método de Kohn-Sham.
- Aproximaciones al potencial de intercambio-correlación (DFAs).
-

En la parte de Métodos de la Química Cuántica se cubre la formulación de los principales métodos "ab initio". En el apartado correspondiente a la Teoría del Funcional de la Densidad se pretende que el alumno entienda los principios básicos de la teoría y comprenda cómo se desarrollan los principales tipos de funcionales de intercambio-correlación y sus características. El alumno debe ser capaz de discernir entre los diferentes métodos existentes cómo seleccionar el más adecuado para cada problema.

1.14. Referencias de consulta

- Helgaker, T., Jørgensen, P., Olsen, J.; Molecular Electronic-Structure Theory. John Wiley & Sons Ltd, 2000
- Szabo, A., Ostlund, N. S.; Modern Quantum Chemistry. Introduction to Advanced Electronic Structure Theory. McGraw-Hill, 1989
- Roos, B. Editor; Lecture notes in quantum chemistry: European summer school in quantum chemistry. Springer-Verlag 1994. Chapters on CC, CI, MCSCF, calibration
- Linear-Scaling Techniques in Computational Chemistry and Physics. Zaleśny, R.; Papadopoulos, M.G.; Mezey, P.G.; Leszczynski, J. (Eds.). Springer (Berlin) 2011
- A Chemist's Guide to Density Functional Theory. W. Koch and M.C. Holthausen, Wiley-VCH, 2001
- Density-Functional Theory of Atoms and Molecules. R.G. Parr and W. Yang, Oxford University Press, New York, 1989
- Electronic Structure. R.M. Martin, Cambridge University Press, Cambridge, 2004

2. Metodologías docentes y tiempo de trabajo del estudiante

2.1. Presencialidad

	#horas
Porcentaje de actividades presenciales (mínimo 33% del total)	35
Porcentaje de actividades no presenciales	90

2.2. Relación de actividades formativas

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

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	3/4
Firmado por:	Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas			
Url de Verificación:		Página:	3/4	

Clases teóricas en aula	20
Seminarios	15
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, o, por video conferencia de dos horas basándose en los materiales docentes publicados en la plataforma Moodle.

Docencia en red. Se utilizará las distintas herramientas que ofrece la plataforma Moodle (<http://www.uam.es/moodle>).
Publicación de contenidos de la asignatura, herramientas de trabajo en grupo: foros de discusión y wiki, correo electrónico

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

Seminarios online. Con posterioridad a las clases expositivas, se realizarán seminarios online para discutir los resultados obtenidos en los trabajos propuestos, las dudas sobre las metodologías empleadas, y supervisar la preparación de los informes elaborados por los estudiantes.

3. Sistemas de evaluación y porcentaje en la calificación final

3.1. Convocatoria ordinaria

Los conocimientos adquiridos por el estudiante serán evaluados a lo largo de todo el curso, intentando que el estudiante avance de forma regular y constante en la asimilación de los contenidos de la asignatura.

La nota final de la asignatura se basará en los ejercicios, trabajos y discusión de los mismos que se irá realizando durante el curso. Dichos trabajos se puntuarán en base a los siguientes porcentajes:

- 70 % Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura,
- 30 % la discusión que sobre la misma se realice con el profesor en tutorías y seminarios.

3.1.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura (podrán ser exámenes a lo largo del curso sobre los contenidos que se han impartido).	60
Discusión en tutorías y/o seminarios sobre los ejercicios, trabajos, o prácticas realizadas en la asignatura.	40

3.2. Convocatoria extraordinaria

Se realizará un examen final único que será de carácter teórico y que abarcará los contenidos de toda la asignatura. La puntuación en la convocatoria extraordinaria se realizará en base a los siguientes porcentajes:

- 70% el examen final,
- 30 % Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura.

3.2.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Examen final (máximo 70% de la calificación final o el porcentaje que figure en la memoria)	70
Evaluación continua	30

4. Cronograma orientativo

Por favor, comprobar el horario oficial publicado en la página web del Máster.

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	4/4
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	4/4	



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE MADRID

32528 - MÉTODOS DE LA QUÍMICA TEÓRICA II

Información de la asignatura

Código - Nombre: 32528 - MÉTODOS DE LA QUÍMICA TEÓRICA II

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

651 - Máster Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelización Computacional

666 - Programa de Doctorado 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

762 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2021)

Centro: 104 - Facultad de Ciencias

Curso Académico: 2023/24

1. Detalles de la asignatura

1.1. Materia

Métodos de la Química Teórica II.

1.2. Carácter

616 - Obligatoria

762 - Obligatoria

666 - Complementos de Formación

651 - Obligatoria

748 - Obligatoria

751 - Obligatoria

1.3. Nivel

616 - Máster (MECES 3)

666 - Doctorado (MECES 4)

762 - Máster (MECES 3)

651 - Máster (MECES 3)

748 - Máster (MECES 3)

751 - Máster (MECES 3)

1.4. Curso

751 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional Europeo: 1

666 - Programa de Doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional: 99

651 - Máster Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelización Computacional: 1

748 - Máster Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelización Computacional: 1

762 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2021): 1

616 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2013): 1

1.5. Semestre

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	1/5
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	1/5	

Anual

1.6. Número de créditos ECTS

5.0

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/a de la asignatura

<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.

CG02 - Los estudiantes son capaces de resolver problemas y tomar decisiones de cualquier índole bajo el compromiso con la defensa y práctica de las políticas de igualdad.

TRANSVERSALES:

CT01 - El/la estudiante es capaz de adaptarse a diferentes entornos culturales demostrando que responde al cambio con flexibilidad.

ESPECÍFICAS:

CE01 - Los estudiantes demuestran su conocimiento y comprensión de los hechos aplicando conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química Teórica y Modelización Computacional.

CE04 - Comprende los fundamentos teóricos y prácticos de técnicas computacionales con las que puede analizar la estructura electrónica, morfológica y estructural de un compuesto e interpreta adecuadamente los resultados.

CE12 - Está familiarizado con los postulados fundamentales de la Mecánica Cuántica necesarios para un buen entendimiento de los métodos más comunes utilizados en química cuántica.

CE16 - El/la estudiante es capaz de discernir entre los diferentes métodos existentes y cómo seleccionar el más adecuado para cada problema.

1.12.2. Resultados de aprendizaje

Esta es la segunda asignatura del Máster dedicada a métodos de la Química Teórica y Computacional. En este caso el acento se pone en los métodos para el estudio de sistemas moleculares de gran tamaño y con un gran número de conformaciones accesibles. Por ello la asignatura se centra en tres grandes objetivos:

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	2/5
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	2/5	

- Cálculo de la energía para sistemas de gran tamaño: Campos de fuerza, métodos de continuo y métodos QM/MM
- Exploración del espacio configuracional: Métodos de dinámica molecular clásica y cuántica
- Obtención de propiedades dinámicas a través de simulaciones de de dinámica molecular

1.12.3. Objetivos de la asignatura

Más específicamente, se plantean una serie de objetivos particulares en forma de preguntas:

- ¿Cómo podemos describir sistemas moleculares muy grandes, tales como proteínas o ácidos nucleicos?
- ¿Cómo describir sistemas moleculares muy grandes cuando se necesita una descripción cuántica de parte de él?
- ¿Cómo describir interacciones intermoleculares en sistemas grandes?
- ¿Cómo describir moléculas en disolución?
- ¿Cuáles son las ventajas y desventajas de los modelos de continuo?
- ¿Cómo obtener propiedades promedio y de equilibrio en sistemas con muchas configuraciones accesibles?
- ¿Cómo se pueden calcular propiedades dependientes del tiempo?

1.13. Contenidos del programa

Unidad 1. Interacciones intermoleculares: Introducción. Interacciones de largo alcance. Interacciones repulsivas. Interacción total, modelos y limitaciones

Unidad 2. Campos de fuerza: Introducción. Términos energéticos. Ejemplos. Validación

Unidad 3. Métodos de simulación. Introducción. Descripción del sistema. Dinámica Molecular. Cuestiones prácticas

Unidad 4. Geometría molecular y energía. Superficies de energía potencial (PES). Exploración y caracterización de puntos estacionarios. Propiedades moleculares. Espacio conformacional de moléculas biológicas

Unidad 5. Modelos de solvatación aplicados en Mecánica Cuántica; Modelos discretos; Modelos continuos; Modelos mixtos discreto-continuos o semicontinuos; Modelos híbridos QM/MM; Aplicaciones

Unidad 6. Técnicas de simulación por ordenador basadas en métodos estadísticos. Introducción; Análisis de Modos Normales; Cálculo de propiedades termodinámicas y estructurales; Energía libre de Gibbs y Helmholtz; Energía libre y funciones de partición; Energía libre y promedios; "The Particle Insertion"; "Free Energy Perturbation"; "Thermodynamic Integration"; "Slow Growth"; "Umbrella Sampling"; Problemas y limitaciones

Unidad 7. Métodos de simulación avanzados: Introducción. Dinámica Molecular Ab Initio. Dinámica Molecular Carr-Parrinello

Unidad 8. Métodos avanzados para el cálculo de energía libre. Métodos basados en caminos físicos: nudged elastic band, dimer method, string method, growing string method, transition path sampling, Parallel Tempering, Replica Exchange MD. Métodos basados en el "History-dependent biasing potential": Metadynamics (MTD) y Paradyamics (PD).

Prácticas:

Práctica 1. Obtención de parámetros para un campo de fuerza mediante cálculo cuánticos

Práctica 2. Simulación de Dinámica Molecular de disoluciones acuosas

Práctica 3. Simulación de Dinámica Molecular de una proteína

Práctica 4. Reactividad: cálculo de un perfil de reacción en fase gas

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

Práctica 6. Cálculo de efectos cinéticos isotópicos

1.14. Referencias de consulta

- M. P. Allen, D. J. Tildesley. *Computer Simulation of Liquids*. Oxford University Press, New York 1989
- A. R. Leach. *Molecular Modelling*. Longman, London, 1996
- D. Frenkel & B. Smit. *Understanding Molecular Simulation*. Academic Press, San Diego, 1996
- A. Stone. *The Theory of Intermolecular Forces*. Oxford University Press, 2013

2. Metodologías docentes y tiempo de trabajo del estudiante

2.1. Presencialidad

	#horas
Porcentaje de actividades presenciales (mínimo 33% del total)	35
Porcentaje de actividades no presenciales	90

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	3/5
Firmado por:	Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas			
Url de Verificación:		Página:	3/5	

2.2. Relación de actividades formativas

Actividades presenciales	Nº horas
Clases teóricas en aula	20
Seminarios/ Clases prácticas	15
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 o por video conferencia de dos horas basándose en los materiales docentes publicados en la plataforma Moodle.

Lección Práctica: El profesor expondrá ejercicios basados en los conceptos estudiados para ponerlos en práctica mediante cálculos.

Docencia en red. Se utilizará las distintas herramientas que ofrece la plataforma Moodle (<https://posgrado.uam.es>).
Publicación de contenidos de la asignatura, herramientas de trabajo en grupo: foros de discusión y wiki, correo electrónico

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

Seminarios online. Con posterioridad a las clases expositivas, se realizarán seminarios online para discutir los resultados obtenidos en los trabajos propuestos, las dudas sobre las metodologías empleadas, y supervisar la preparación de los informes elaborados por los estudiantes.

3. Sistemas de evaluación y porcentaje en la calificación final

3.1. Convocatoria ordinaria

Los conocimientos adquiridos por el estudiante serán evaluados a lo largo de todo el curso, intentando que el estudiante avance de forma regular y constante en la asimilación de los contenidos de la asignatura.

La nota final de la asignatura se basará en los ejercicios, trabajos y discusión de los mismos que se irá realizando durante el curso. Los ejercicios se basarán en los contenidos de las clases prácticas del curso.

3.1.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Examen final (máximo 70% de la calificación final o el porcentaje que figure en la memoria)	
Evaluación continua	

3.2. Convocatoria extraordinaria

Se realizará un examen final único que será de carácter teórico y que abarcará los contenidos de toda la asignatura. La puntuación en la convocatoria extraordinaria se realizará en base a los siguientes porcentajes:

- 70% el examen final,
- 30 % la realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura.

3.2.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Examen final (máximo 70% de la calificación final o el porcentaje que figure en la memoria)	70
Evaluación continua	30

4. Cronograma orientativo

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	4/5
Firmado por:	Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas			
Url de Verificación:		Página:	4/5	

Por favor, comprobar el horario oficial publicado en la página web del Máster.

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	5/5
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	5/5	



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE MADRID

32529 - PROFUNDIZACIÓN EN LOS MÉTODOS DE LA QUÍMICA TEÓRICA

Información de la asignatura

Código - Nombre: 32529 - PROFUNDIZACIÓN EN LOS MÉTODOS DE LA QUÍMICA TEÓRICA

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
762 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2021)

Centro: 104 - Facultad de Ciencias

Curso Académico: 2023/24

1. Detalles de la asignatura

1.1. Materia

Profundización en los Métodos de la Química Teórica.

1.2. Carácter

Optativa

1.3. Nivel

Máster (MECES 3)

1.4. Curso

1

1.5. Semestre

Anual

1.6. Número de créditos ECTS

5.0

1.7. Idioma

English

1.8. Requisitos previos

No hay.

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	1/5
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	1/5	

1.9. Recomendaciones

No hay.

1.10. Requisitos mínimos de asistencia

La asistencia a las clases es obligatoria.

1.11. Coordinador/a de la asignatura

Marcos Mandado Alonso - Universidad de Vigo

<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.

CG02 - Los estudiantes son capaces de resolver problemas y tomar decisiones de cualquier índole bajo el compromiso con la defensa y práctica de las políticas de igualdad.

TRANSVERSALES:

CT02 - El/la estudiante es organizado en el trabajo demostrando que sabe gestionar el tiempo y los recursos de que dispone.

ESPECÍFICAS:

CE01 - Los estudiantes demuestran su conocimiento y comprensión de los hechos aplicando conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química Teórica y Modelización Computacional.

CE04 - Comprende los fundamentos teóricos y prácticos de técnicas computacionales con las que puede analizar la estructura electrónica, morfológica y estructural de un compuesto e interpreta adecuadamente los resultados.

CE15 - Entiende los principios básicos de las metodologías "ab initio" y Teoría de los Funcionales de la Densidad.

CE16 - El/la estudiante es capaz de discernir entre los diferentes métodos existentes y cómo seleccionar el más adecuado para cada problema.

1.12.2. Resultados de aprendizaje

El objeto del presente curso es proporcionar a los estudiantes una visión más profunda de los métodos empleados en Química teórica, haciendo especial hincapié en que los estudiantes profundicen en los siguientes aspectos:

- Conocimiento de la problemática específica de los métodos mecanocuánticos aplicados a sistemas de gran tamaño.
- comprensión y capacidad de discriminación entre distintos métodos analíticos útiles para resolver integrales moleculares monoeléctricas y bielectrónicas según la naturaleza de dichas integrales.
- Comprensión de las características esenciales de los métodos numéricos utilizados para resolver integrales moleculares. Como consecuencia, capacidad para modificar parámetros propios de cada método para resolver problemas prácticos y para escoger el método más adecuado a un problema concreto.
- Conocimiento detallado de algunos métodos que aceleran el proceso de resolución de ecuaciones autoconsistentes.
- Conocimiento de los fundamentos de los métodos locales para evaluar la energía de correlación.
- Conocimiento detallado de las bases metodológicas de los métodos más comunes.
- Capacidad para estimar coste computacional y escalado
- Estimación de la magnitud de los errores asociados
- Capacidad para determinar su posibilidad de aplicación a un problema concreto.

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	2/5
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	2/5	

- Teoría del funcional de la densidad: matemática avanzada, funcionales y conceptos recientes.
- Retos y perspectivas de la teoría del funcional de la densidad.

1.12.3. Objetivos de la asignatura

-

1.13. Contenidos del programa

- Integrales moleculares monoeléctricas. Propiedades y técnicas de cálculo analíticas y numéricas.
- Integrales moleculares bielectrónicas. Screening, métodos directos, técnicas de descomposición. Métodos pseudoespectrales. Aplicación del desarrollo multipolar.
- Ecuaciones SCF. Convergencia. Métodos adaptados a matrices dispersas.
- Eficiencia y escalado de los métodos. Coste computacional.
- Introducción a la correlación electrónica.
- Métodos basados en la función de onda: Interacción de configuraciones
Coupled Cluster
Teoría de Perturbaciones. Métodos MPn
Métodos multireferenciales
- Bases para el cálculo de la energía de correlación.
- Introducción a los métodos explícitamente correlacionados.
- Métodos locales de correlación electrónica.
- Sistemas Intermoleculares. Métodos de partición de la energía de interacción.
- Teoría del Funcional de la Densidad (DFT)
- Desarrollo de funcionales de intercambio-correlación: LDA, GGA, híbridos e ideas recientes -Condiciones exactas, conexión adiabática y otras aproximaciones
- Autoenergías Kohn-Sham y el método OEP
- Extensión a sistemas con un número no entero de partículas y espín: error de deslocalización electrónica y error de correlación estática
- DFT dependiente del tiempo: respuesta lineal y propagación explícita en el tiempo
- Grandes retos de las aproximaciones más populares en DFT: sistemas fuertemente correlacionados
- El funcional exacto de DFT

1.14. Referencias de consulta

- F. Jensen, Introduction to Computational Chemistry, John Wiley & Sons, Chichester, 1999
- D. B. Cook, Handbook of Computational Quantum Chemistry, Oxford University Press, Oxford, 1998
- A. Szabo and N. S. Ostlund, Modern Quantum Chemistry, Dover publications Mineola, 1996
- T. Helgaker and P. R. Taylor, Gaussian basis sets and molecular integrals, World Scientific, Singapore, 1995
- D. R. Yarkony (Ed.) Direct Methods in Electronic Structure Theory, Vol. part I, World Scientific, Singapore, 1995
- Helgaker, T., Jørgensen, P., Olsen, J.; Molecular Electronic-Structure Theory. John Wiley & Sons Ltd, 2000.
- Roos, B. Editor; Lecture notes in quantum chemistry: European summer school in quantum chemistry. Springer-Verlag 1994. Chapters on CC, CI, MCSCF, calibration.
- Robert G. Parr and Weitao Yang: Density Functional Theory for Atoms and Molecules. Oxford University Press, 1994.
- A. J. Cohen, P. Mori-Sánchez and W. Yang, Challenges for Density Functional Theory, Chemical Reviews, 112, 208 (2012).
- Dreizler and Gross, Density Functional Theory: An approach to the quantum many-body problem, Springer-Verlag (1990)
- Axel Becke, Perspective: Fifty years of density-functional theory in chemical physics J. Chem. Phys. 140, 18A301 (2014)

2. Metodologías docentes y tiempo de trabajo del estudiante

2.1. Presencialidad

	#horas
Porcentaje de actividades presenciales (mínimo 33% del total)	35
Porcentaje de actividades no presenciales	90

2.2. Relación de actividades formativas

Actividades presenciales	Nº horas
Clases teóricas en aula	20
Seminarios	15

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	3/5
Firmado por:	Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas			
Url de Verificación:		Página:	3/5	

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, o, por video conferencia de dos horas basándose en los materiales docentes publicados en la plataforma Moodle.

Docencia en red. Se utilizará las distintas herramientas que ofrece la plataforma Moodle (<https://posgrado.uam.es>).
Publicación de contenidos de la asignatura, herramientas de trabajo en grupo: foros de discusión y wiki, correo electrónico

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

Seminarios online. Con posterioridad a las clases expositivas, se realizarán seminarios online para discutir los resultados obtenidos en los trabajos propuestos, las dudas sobre las metodologías empleadas, y supervisar la preparación de los informes elaborados por los estudiantes.

3. Sistemas de evaluación y porcentaje en la calificación final

3.1. Convocatoria ordinaria

El aprendizaje y la formación adquirida por el estudiante serán evaluados a lo largo de todo el curso, intentando que el estudiante avance de forma regular y constante en la asimilación de los contenidos de la asignatura. La nota comprende resolución de ejercicios (en un total del 60%), informe de ejercicios y trabajos (30%) que se entregarán en conjunto con una parte de los ejercicios, y discusión sobre los mismos (10%).

El 50% de la nota final de la asignatura se basará en la resolución de ejercicios relacionados con los vistos en clase, a modo de examen de carácter teórico que abarcará los contenidos de toda la asignatura. Del 50% restante, de los ejercicios, trabajos y discusión de los mismos que realizará el estudiante. Dichos trabajos se puntuarán en base a los siguientes porcentajes:

- (40% de la nota total) que el estudiante presentará contenido en una memoria (que contendrá aspectos de todos los temas tratados en la asignatura), con porcentajes:
 - 10% de la nota total: ejercicios contenidos en el informe/memoria
 - 30% de la nota total: trabajo de las clases prácticas, contenido en el informe/memoria
 - 10% discusión de ejercicios y memoria que se realice con los profesores en tutorías y seminarios.

3.1.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Ejercicios relacionados con la asignatura a modo de examen final (máximo 70% de la calificación final o el porcentaje que figure en la memoria) Evaluación continua: ejercicios con contenidos de asignaturas- a entregar con el informe/memoria	50
	10
	Total 60
Evaluación continua: informe/memoria prácticas realizadas con un trabajo detallado	30
Participación en las clases: discusión sobre la memoria y ejercicios realizados	10

3.2. Convocatoria extraordinaria

Se evaluarán los contenidos suspensos en la convocatoria ordinaria por medio de trabajos centrados en dichos contenidos, que el alumno realizará de forma personal en un plazo fijado.

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	4/5
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	4/5	

3.2.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Examen final (máximo 70% de la calificación final o el porcentaje que figure en la memoria)	
Evaluación continua	

4. Cronograma orientativo

Por favor, comprobar el horario oficial publicado en la página web del Máster.

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	5/5
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	5/5	



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE MADRID

32525 - SIMETRÍA EN ÁTOMOS, MOLÉCULAS Y SÓLIDOS

Información de la asignatura

Código - Nombre: 32525 - SIMETRÍA EN ÁTOMOS, MOLÉCULAS Y SÓLIDOS

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
762 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2021)

Centro: 104 - Facultad de Ciencias

Curso Académico: 2023/24

1. Detalles de la asignatura

1.1. Materia

Simetría en átomos, moléculas y sólidos.

1.2. Carácter

Obligatoria

1.3. Nivel

Máster (MECES 3)

1.4. Curso

1

1.5. Semestre

Anual

1.6. Número de créditos ECTS

5.0

1.7. Idioma

English

1.8. Requisitos previos

No hay.

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	1/4
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	1/4	

1.9. Recomendaciones

No hay.

1.10. Requisitos mínimos de asistencia

La asistencia a las clases es obligatoria.

1.11. Coordinador/a de la asignatura

<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.

TRANSVERSALES

CT01 - El/la estudiante es capaz de adaptarse a diferentes entornos culturales demostrando que responde al cambio con flexibilidad.

ESPECÍFICAS

CE11 - El/la estudiante posee la base matemática necesaria para el correcto tratamiento de la simetría en átomos, moléculas y sólidos, con énfasis en las posibles aplicaciones.

CE17 - Los estudiantes comprenden y manejan las herramientas matemáticas requeridas para el desarrollo de la Química Teórica en sus aspectos fundamentales y sus aplicaciones.

1.12.2. Resultados de aprendizaje

Dotar al alumno de la base matemática necesaria para el correcto tratamiento de la simetría en átomos, moléculas y sólidos, con énfasis en las posibles aplicaciones.

1.12.3. Objetivos de la asignatura

-

1.13. Contenidos del programa

1. Teoría de Grupos y simetría

- Introducción a la teoría de grupos abstractos
- Introducción a la teoría de representaciones
- Representaciones matriciales de grupos de simetría
- Representaciones irreducibles

2. Simetría en moléculas

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	2/4
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	2/4	

- Grupos y representaciones en mecánica cuántica
- Aplicaciones de la teoría de grupos en química cuántica
- Grupo de rotaciones SO(3)

3. Simetría en Sólidos

- Grupos espaciales
- Estructuras isótropas y anisótropas
- Red recíproca de una red de Bravais.
- Aplicación a funciones de onda electrónicas

1.14. Referencias de consulta

Charles C. Pinter *A Book of Abstract Algebra*, Dover, (New York) 2010

Roy Mc Weeny *Symmetry. An Introduction to Group Theory and its Applications*, Dover (New York) 2002

Philip R. Bunker *Molecular Symmetry and Spectroscopy*, Academic Press (London) 1979

D.M. Bishop, *Group Theory and Chemistry*. Clarendon Press (New York) 1973

D. Schonland, *Molecular Symmetry. An introduction to Group Theory and it uses in Chemistry*, Van Nostrand 1965

M. Tinkham. *Group Theory and Quantum Mechanics*. MacGraw Hill (New York) 1974 Dove, *Structure and Dynamics*. Oxford University Press (Oxford) 2003

C. Hammond. *The Basics of Crystallography and Diffraction*. Oxford University Press (Oxford) 2001

C. Kittel. *Introduction to Solid State Physics*. Wiley (New York) 2004

N.W. Ashcroft y N.D. Mermin. *Solid State Physics*. Saunders College () 1976

M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus y A. Jorio, *Group Theory: Applications to the Physics of Condensed Matter*, Springer (2008)

2. Metodologías docentes y tiempo de trabajo del estudiante

2.1. Presencialidad

	#horas
Porcentaje de actividades presenciales (mínimo 33% del total)	40
Porcentaje de actividades no presenciales	85

2.2. Relación de actividades formativas

Actividades presenciales	Nº horas
Clases teóricas en aula	20
Seminarios	20
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 de dos horas basándose en los materiales docentes publicados en la plataforma Moodle.

Docencia en red. Se utilizará las distintas herramientas que ofrece la plataforma Moodle (<https://posgrado.uam.es>).
Publicación de contenidos de la asignatura, herramientas de trabajo en grupo: foros de discusión y wiki, correo electrónico

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

Seminarios online. Con posterioridad a las clases expositivas, se realizarán seminarios online para discutir los resultados

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	3/4
Firmado por:	Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas			
Url de Verificación:		Página:	3/4	

obtenidos en los trabajos propuestos, las dudas sobre las metodologías empleadas, y supervisar la preparación de los informes elaborados por los estudiantes.

3. Sistemas de evaluación y porcentaje en la calificación final

3.1. Convocatoria ordinaria

Los conocimientos adquiridos por el estudiante serán evaluados a lo largo de todo el curso, intentando que el estudiante avance de forma regular y constante en la asimilación de los contenidos de la asignatura.

La nota final de la asignatura se basará en los ejercicios, trabajos y discusión de los mismos que se irá realizando durante el curso además de test llevados a cabo a mitad y final del curso. Dichos trabajos se puntuarán en base a los siguientes porcentajes:

- 50 % Simetría en átomos y moléculas
 - resolución de problemas de carácter práctico y/o teórico relacionados con la asignatura que se especificarán durante el curso.
- 50 % Simetría en sólidos cristalinos
 - 30% realización de resolución de 2 problemas estándar relacionados con la asignatura y que se entregarán durante el curso intensivo
 - 20% realización de 1 ejercicio avanzados a llevar a cabo con ordenador usando un código libre para el cálculo de estructuras de bandas así como herramientas disponibles en internet (servidor de cristalografía de Bilbao).

3.1.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Examen final (máximo 70% de la calificación final o el porcentaje que figure en la memoria)	
Evaluación continua	

3.2. Convocatoria extraordinaria

Se realizará un examen final único que será de carácter teórico y que abarcará los contenidos de toda la asignatura. La puntuación en la convocatoria extraordinaria se realizará en base a los siguientes porcentajes:

- 70% el examen final,
- 30% Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura.

3.2.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Examen final (máximo 70% de la calificación final o el porcentaje que figure en la memoria)	70
Evaluación continua	30

4. Cronograma orientativo

Por favor, comprobar el horario oficial publicado en la página web del Máster.

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	4/4
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	4/4	



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE MADRID

31248 - SÓLIDOS

Información de la asignatura

Código - Nombre: 31248 - SÓLIDOS

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
762 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2021)

Centro: 104 - Facultad de Ciencias

Curso Académico: 2023/24

1. Detalles de la asignatura

1.1. Materia

Sólidos.

1.2. Carácter

Optativa

1.3. Nivel

Máster (MECES 3)

1.4. Curso

1

1.5. Semestre

Anual

1.6. Número de créditos ECTS

5.0

1.7. Idioma

English

1.8. Requisitos previos

No hay.

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	1/5
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	1/5	

1.9. Recomendaciones

No Hay

1.10. Requisitos mínimos de asistencia

La asistencia a las clases es obligatoria.

1.11. Coordinador/a de la asignatura

Antonio Márquez Cruz - Universidad de Sevilla

<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.

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:

CT03 - El/la estudiante posee capacidad de análisis y síntesis de tal forma que pueda comprender, interpretar y evaluar la información relevante asumiendo con responsabilidad su propio aprendizaje o, en el futuro, la identificación de salidas profesionales y yacimientos de empleo.

ESPECÍFICAS

CE03 - Adquiere una visión global de las distintas aplicaciones de la Química Teórica y modelización en campos de la Química, Bioquímica, Ciencias de Materiales, Astrofísica y Catálisis.

CE04 - Comprende los fundamentos teóricos y prácticos de técnicas computacionales con las que puede analizar la estructura electrónica, morfológica y estructural de un compuesto e interpreta adecuadamente los resultados.

CE28 - Proporcionar la metodología básica para el tratamiento de sistemas periódicos, cristales y polímeros.

1.12.2. Resultados de aprendizaje

Proporcionar al alumno la metodología básica para el tratamiento en sistemas condensados periódicos puros y con defectos de los siguientes aspectos: Cristalografía; Estructura electrónica; Termodinámica; Transiciones de fase; Superficies; Catálisis heterogénea; Propiedades ópticas en materia condensada; Magnetismo.

En el curso los estudiantes recibirán una introducción intensiva a la modelización y tratamiento de estos problemas en el estado sólido.

1.12.3. Objetivos de la asignatura

-

1.13. Contenidos del programa

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	2/5
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	2/5	

1. CRISTALOGRAFÍA

- 1.1 Simetría en cristales.
- 1.2 Espacio recíproco

2. ESTRUCTURA ELECTRÓNICA

- 2.1 Modelos de clúster y modelos periódicos
- 2.2 Metodologías de cálculo

3. TERMODINÁMICA

- 3.1 Aproximación estática y modelos térmicos
- 3.2 Transiciones de fase

4. ENLACE QUÍMICO

- 4.1 Topologías inducidas por campos escalares en cristales
- 4.2 Caracterización del enlace químico en sólidos y relación con propiedades macroscópicas

5. CÁLCULOS AB INITIO DE ESTRUCTURA ELECTRÓNICA EN SÓLIDOS

- 5.1 Comparación de métodos basados en la función de onda y en el funcional de la densidad
- 5.2 De las bases de datos cristalográficas a los cálculos de estructura electrónica

6. PROPIEDADES TERMODINÁMICAS DE SÓLIDOS CRISTALINOS

- 6.1 Curva E(V) y modelo estático
- 6.2 Fonones en cristales

7. SIMULACIÓN AB INITIO DE LA ESTRUCTURA, PROPIEDADES TERMODINÁMICAS Y REACTIVIDAD EN SUPERFICIES

- 8.1 Modelos de cluster y modelos periódicos
- 8.2 Estructura de superficies. Reconstrucción.
- 8.3 Adsorción y reactividad en superficies

8. PROPIEDADES ÓPTICAS

- 8.1 Química cuántica y las ecuaciones de Maxwell macroscópicas
- 8.2 Aplicaciones

9. ELEMENTOS DE MAGNETISMO MOLECULAR Y CRISTALINO

- 9.1 Hamiltonianos modelo y efectivos
- 9.2 Aplicaciones

1.14. Referencias de consulta

- [01] L. Kantorovich, "Quantum Theory of the Solid State" (Kluwer, Dordrecht, The Netherlands, 2004).
- [02] R. M. Martin, "Electronic Structure: Basic theory and practical methods" (Cambridge UP, Cambridge, UK, 2004).
- [03] E. Kaxiras, "Atomic and Electronic Structure of Solids" (Cambridge UP, Cambridge, UK, 2003).
- [04] O. Anderson, "Equations of State for Solids in Geophysics and Ceramic Science" (Oxford UP, Oxford, UK, 1995).
- [05] A. Otero-de-la-Roza and V. Luaña, "Equations of state and thermodynamics of solids using empirical corrections in the quasiharmonic approximation", Phys. Rev. B 84 (2011) 024109.
- [06] A. R. Oganov, Ed, "Modern methods of crystal structure prediction" (Wiley-VCH, 2011).
- [07] J. P. Poirier, "Introduction to the Physics of the Earth's Interior" (Cambridge UP, Cambridge, UK, 2000).
- [08] B. Bersuker, "The Jahn-Teller effect" (Cambridge UP, Cambridge, UK, 2006).

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	3/5
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	3/5	

- [09] E. R. Johnson, S. Keinan, P. Mori-Sanchez, J. Contreras-Garcia, A. J. Cohen, and W. Yang, "Revealing Noncovalent Interactions", *J. Am. Chem. Soc.* 132, 6498 (2010)
- [10] B. Silvi, A. Savin, "Classification of chemical bonds based on the topological analysis of electron localization functions", *Nature* 371, 683 (1994)
- [11] J. Contreras-Garcia, A. M. Pendas, B. Silvi, J. M. Recio, "Computation of local and global properties of the ELF topology in crystals", *J. Theor. Chem. Comp.* 113, 1068 (2009)
- [12] A. Otero-de-la-Roza, J. Contreras-Garcia, E. R. Johnson, "Revealing non-covalent interactions in solids, NCI plots revisited" *Phys. Chem. Chem. Phys.* 14, 12165 (2012)
- [13] P. García-Fernández, J. Wojdel, J. Iñiguez and J. Junquera "Second-principles method for materials simulations including electron and lattice degrees of freedom" *Phys. Rev. B* 93, 195137 (2016)
- [14] M. S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, A. Jorio "Group Theory: Applications to the Physics of Condensed Matter" (Springer, 2007)
- [15] J.L. Whitten and H. Yang, "Theory of Chemisorption and reactions on metal surfaces" *Surf. Sci. rep.* 24, 59 (1996)
- [16] A. R. Leach, "Molecular modeling" (Prentice Hall, 2001).
- [17] T. Schlick, "Molecular modeling and simulation" (Springer, 2002).
- [18] D. Marx and J. Hutter, "Ab initio molecular dynamics: Theory and implementation", in "Modern methods and algorithms on quantum chemistry" by J. Grotendorst (Ed.), (John von Neumann Institute, NIC series vol. 1 & 3, 2000).
- [19] C. Fiolhais, F. Nogueira and M. A. L. Marques, Eds. "A Primer in Density Functional Theory", (Springer, Heidelberg, 2003).
- [20] R. Dronskowski "Computational Chemistry of Solid State Materials" (Wiley-VCH, 2005).
- [21] P. Huang, and E. A. Carter, "Advances in Correlated Electronic Structure Methods for Solids, Surfaces and Nanostructures", *Ann. Rev. Phys. Chem.* 59 (2008) 261.
- [22] G. Pacchioni, A. M. Ferrari, A. M. Márquez, and F. Illas, "Importance of Madelung Potential in Quantum Chemical Modeling of Ionic Surfaces", *J. Comput. Chem.* 18 (1997) 617.
- [23] J. N. Norskov, F. Abild-Pedersen, F. Studt, and T. Bligaard "Density functional theory in surface chemistry and catalysis" *PNAS* 108 (2011) 937-943.
- [24] F. Yang, J. Graciani, J. Evans, P. Liu, J. Hrbek, J. Fernández. Sanz, and J. A. Rodríguez, "CO oxidation on inverse CeOx/Cu(111) Catalysts: High catalytic activity and ceria-promoted dissociation of O2", *J. Am. Chem. Soc.* 133 (2011) 3444.
- [25] C. de Graaf, R. Broer, "Magnetic Interactions in Molecules and Solids" Second volume of the textbooks of the TCCM Master. (Springer 2015).
- [26] J. P. Malrieu, R. Caballol, C. J. Calzado, C. de Graaf, N. Guihéry "Magnetic Interactions in Molecules and Highly Correlated Materials: Physical Content, Analytical Derivation, and Rigorous Extraction of Magnetic Hamiltonians", *Chemical Reviews* 114, 429-492 (2014)

2. Metodologías docentes y tiempo de trabajo del estudiante

2.1. Presencialidad

	#horas
Porcentaje de actividades presenciales (mínimo 33% del total)	40
Porcentaje de actividades no presenciales	75

2.2. Relación de actividades formativas

Actividades presenciales	Nº horas
Clases teóricas en aula	40
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	
Actividades de evaluación	
Otras	

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	4/5
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	4/5	

Lección Magistral: El profesor expondrá los contenidos del curso en sesiones presenciales de dos horas basándose en los materiales docentes publicados en la plataforma Moodle.

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

Resolución de ejercicios prácticos: Problemas numéricos, cuestiones tipo test, interpretación y procesamiento de la información, evaluación de publicaciones científicas, etc.

Informes o memorias escritas: Orientación y supervisión en la preparación de informes o memorias escritas.

3. Sistemas de evaluación y porcentaje en la calificación final

3.1. Convocatoria ordinaria

Los conocimientos adquiridos por el estudiante serán evaluados a lo largo de todo el curso, intentando que el estudiante avance de forma regular y constante en la asimilación de los contenidos de la asignatura.

La nota final de la asignatura se basará en los ejercicios, trabajos y discusión de los mismos que se irá realizando durante el curso. Dichos trabajos se puntuarán en base a los siguientes porcentajes:

- 60% Realización de un examen práctico sobre la teoría y las prácticas de la asignatura.
- 40% Discusión en tutorías y/o seminarios. Este porcentaje estará dividido en un 20% de discusión de ejercicios y un 20% en la realización y discusión de un caso práctico propuesto por uno de los profesores.

3.1.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Examen final (máximo 70% de la calificación final o el porcentaje que figure en la memoria)	60
Evaluación continua	40

3.2. Convocatoria extraordinaria

Se realizará un examen final único que será de carácter teórico y que abarcará los contenidos de toda la asignatura. La puntuación en la convocatoria extraordinaria se realizará en base a los siguientes porcentajes:

- 70% el examen final,
- 30% la realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura.

3.2.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Examen final (máximo 70% de la calificación final o el porcentaje que figure en la memoria)	70
Evaluación continua	30

4. Cronograma orientativo

Por favor, comprobar el horario oficial publicado en la página web del Máster.

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	5/5
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	5/5	



32526 - TÉCNICAS COMPUTACIONALES Y CÁLCULO NUMÉRICO

Información de la asignatura

Código - Nombre: 32526 - TÉCNICAS COMPUTACIONALES Y CÁLCULO NUMÉRICO

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
762 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2021)

Centro: 104 - Facultad de Ciencias

Curso Académico: 2023/24

1. Detalles de la asignatura

1.1. Materia

Técnicas Computacionales y Cálculo Numérico.

1.2. Carácter

Obligatoria

1.3. Nivel

Máster (MECES 3)

1.4. Curso

1

1.5. Semestre

616-Anual o Primer semestre
762-Anual o Primer semestre
651-Anual o Primer semestre
748-Anual o Primer semestre
621-Anual
751-Anual o Primer semestre

1.6. Número de créditos ECTS

5.0

1.7. Idioma

English

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	1/4
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	1/4	

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/a de la asignatura

Pere Alemany - Universidad de Barcelona.

<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.

CG02 - Los estudiantes son capaces de resolver problemas y tomar decisiones de cualquier índole bajo el compromiso con la defensa y práctica de las políticas de igualdad.

TRANSVERSALES:

CT01 - El/la estudiante es capaz de adaptarse a diferentes entornos culturales demostrando que responde al cambio con flexibilidad.

CT03 - El/la estudiante posee capacidad de análisis y síntesis de tal forma que pueda comprender, interpretar y evaluar la información relevante asumiendo con responsabilidad su propio aprendizaje o, en el futuro, la identificación de salidas profesionales y yacimientos de empleo.

ESPECÍFICAS:

CE04 - Comprende los fundamentos teóricos y prácticos de técnicas computacionales con las que puede analizar la estructura electrónica, morfológica y estructural de un compuesto e interpreta adecuadamente los resultados.

CE13 - Los estudiantes manejan las técnicas más usuales de programación en física y en química y está familiarizado con las herramientas de cálculo esenciales en estas áreas.

CE14 - Es capaz de desarrollar programas eficientes en Fortran con el fin de utilizar dichas herramientas en su trabajo cotidiano.

1.12.2. Resultados de aprendizaje

Formar a los alumnos en el manejo de las técnicas más usuales de programación en física y en química y familiarizarlo con las herramientas de cálculo esenciales en estas áreas. El alumno deberá ser capaz de desarrollar programas eficientes con el fin de utilizar dichas herramientas en su trabajo cotidiano.

1.12.3. Objetivos de la asignatura

-

1.13. Contenidos del programa

- Algoritmos y Programación.
- Programación.

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	2/4
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	2/4	

- Cálculo matricial.
- Cálculo Integral.
- Búsqueda de ceros y optimización de funciones.
- Análisis multivariante.

1.14. Referencias de consulta

- Química Teórica y Computacional. J.Andrés y J.Bertrán, Eds. Publ Univ.Jaime I (Castellón) 2000
- Ingeniería del software: Diseño estructurado. J.A. Calco Manzasno y L.Fernández Sanz. Univ. Politécnica de Madrid (Madrid) 1995
- Structured FORTRAN-77 for Engineers and Scientists, D.M. Etter. Addison Wesley Longman (Menlo Park) 1977
- S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling and B. P. Flannery, Numerical Recipes in Fortran (second edition, Univ. Press, Cambridge, 2003)
- A. R. Krommer and C. W. Ueberhuber, Numerical integration on Advance Computer Systems (Springer-Verlag Berlín, Heidelberg, 1994)
- P. J. Davis and P. Rabinowitz, Methods of Numerical Integration (second edition, Academic Press, Inc., London, 1984)
- C. A. Floudas and P. M. Pardalos, Optimization in Computational Chemistry and Molecular Biology – Local and Global Approaches (Springer, 1st edition, 2000)

2. Metodologías docentes y tiempo de trabajo del estudiante

2.1. Presencialidad

	#horas
Porcentaje de actividades presenciales (mínimo 33% del total)	35
Porcentaje de actividades no presenciales	90

2.2. Relación de actividades formativas

Actividades presenciales	Nº horas
Clases teóricas en aula	20
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	8
Actividades de evaluación	
Otras	

Clases en aula de informática. El profesor expondrá los contenidos del curso en sesiones presenciales o por video conferencia de dos horas. 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 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. Durante las sesiones en el aula de informática el estudiante tendrá que realizar distintos programas.

Seminarios online. Con posterioridad a las clases expositivas, se realizarán seminarios online para discutir los resultados obtenidos en los trabajos propuestos, las dudas sobre las metodologías empleadas, y supervisar la preparación de los informes elaborados por los estudiantes.

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

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	3/4
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	3/4	

Los conocimientos adquiridos por el estudiante serán evaluados a lo largo de todo el curso, intentando que el estudiante avance de forma regular y constante en la asimilación de los contenidos de la asignatura.

La nota final de la asignatura se basará en los ejercicios, trabajos y discusión de los mismos que se irá realizando durante el curso.

Dichos trabajos se puntuarán en base a los siguientes porcentajes:

- 70 % Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura,
- 30 % la discusión que sobre la misma se realice con el profesor en tutorías y seminarios.

3.1.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Examen final (máximo 70% de la calificación final o el porcentaje que figure en la memoria)	70
Evaluación continua	30

3.2. Convocatoria extraordinaria

Se realizará un examen final único que será de carácter teórico y que abarcará los contenidos de toda la asignatura. La puntuación en la convocatoria extraordinaria se realizará en base a los siguientes porcentajes:

- 70% el examen final,
- 30 % Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura.

3.2.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Examen final (máximo 70% de la calificación final o el porcentaje que figure en la memoria)	70
Evaluación continua	30

4. Cronograma orientativo

Por favor, comprobar el horario oficial publicado en la página web del Máster.

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	23/05/2023	4/4
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	4/4	