



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE MADRID

## 33427 - DE LA TEORÍA A LA IMPLEMENTACIÓN: TUTORIALES EN QUÍMICA TEÓRICA

### Información de la asignatura

**Código - Nombre:** 33427 - DE LA TEORÍA A LA IMPLEMENTACIÓN: TUTORIALES EN QUÍMICA TEÓRICA

**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

De la teoría a la implementación: tutoriales en química teórica

#### 1.2. Carácter

Optativa

#### 1.3. Nivel

Máster (MECES 3)

#### 1.4. Curso

2

#### 1.5. Semestre

Segundo semestre

#### 1.6. Número de créditos ECTS

6.0

#### 1.7. Idioma

Inglés

#### 1.8. Requisitos previos

No hay.

#### 1.9. Recomendaciones

No hay.

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

## 1.10. Requisitos mínimos de asistencia

La asistencia a clases es obligatoria.

## 1.11. Coordinador/a de la asignatura

Nicolás Suaud (Universidad Paul Sabatier Toulouse III).

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

## 1.12. Competencias y resultados del aprendizaje

### 1.12.1. Competencias

#### BÁSICAS Y GENERALES

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.

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.

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.

#### 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.

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

CT05 - Capacidad de razonamiento y reflexión crítica y autocrítica como vía para mejorar el propio proceso de aprendizaje y la generación y desarrollo de ideas en un contexto profesional o de investigación.

#### ESPECÍFICAS

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.

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.

CE19 - El/la estudiante está familiarizado con las técnicas computacionales que, basadas en la mecánica y dinámica molecular, son la base del diseño de moléculas de interés en campos tales como farmacología, petroquímica, etc.

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

### 1.12.2. Resultados de aprendizaje

No aplica.

### 1.12.3. Objetivos de la asignatura

El objetivo de esta escuela es aprender a implementar la teoría de la química cuántica en el código informático. Por lo tanto, después de una introducción de cada tema, se dedicará mucho tiempo a codificar la teoría en tutoriales prácticos. Los temas incluyen la teoría de Hückel, la teoría de Hartree-Fock, la teoría del DFT, dinámica cuántica y molecular, y magnetismo cuántico.

## 1.13. Contenidos del programa

1. Teoría e implementación del método Hartree-Fock (HF).
2. Teoría e implementación de métodos basados en DFT.
3. Geometría y topología - construyendo nanopartículas.

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

4. Estudio de superficies de energía potencial - Dinámica molecular.
5. Magnetismo cuántico - el modelo de Heisenberg.
6. Dinámica Cuántica.
7. Estructuras de carbono de baja dimensión - la utilidad de los enfoques simples.

### 1.14. Referencias de consulta

-

## 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	20
Prácticas con medios informáticos	20
Actividades de evaluación	3

## 3. Sistemas de evaluación y porcentaje en la calificación final

---

### 3.1. Convocatoria ordinaria

La nota final de la asignatura se basará en: 20% examen final de la asignatura y un 80% correspondiente a la entrega de un informe de ejercicios propuestos por el profesor.

#### 3.1.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Examen final	20
Ejercicios propuestos	80

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

### 3.2. Convocatoria extraordinaria

La evaluación se basará en la entrega de un informe con los ejercicios propuestos.

#### 3.2.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Ejercicios propuestos.	100
Evaluación continua	0

### 4. Cronograma orientativo

El curso estará organizado por la Universidad Paul Sabatier Toulouse III.

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



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE MADRID

## 33423 - MÉTODOS AVANZADOS EN ESTRUCTURA ELECTRÓNICA, DINÁMICA Y MODELIZACIÓN MOLECULAR

### Información de la asignatura

**Código - Nombre:** 33423 - MÉTODOS AVANZADOS EN ESTRUCTURA ELECTRÓNICA, DINÁMICA Y MODELIZACIÓN MOLECULAR

**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

MÉTODOS AVANZADOS EN ESTRUCTURA ELECTRÓNICA, DINÁMICA Y MODELIZACIÓN MOLECULAR

#### 1.2. Carácter

Obligatoria

#### 1.3. Nivel

Máster (MECES 3)

#### 1.4. Curso

2

#### 1.5. Semestre

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

#### 1.6. Número de créditos ECTS

12.0

#### 1.7. Idioma

Inglés

#### 1.8. Requisitos previos

no hay.

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

## 1.9. Recomendaciones

No aplica.

## 1.10. Requisitos mínimos de asistencia

La asistencia a clases es obligatoria.

## 1.11. Coordinador/a de la asignatura

Stefano Evangelisti (Universidad Paul Sabatier Toulouse III).

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

## 1.12. Competencias y resultados del aprendizaje

---

### 1.12.1. Competencias

#### BÁSICAS Y GENERALES

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.

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.

#### TRANSVERSALES

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

CT07 - Saber comunicar y argumentar conocimientos, resultados y conclusiones de la investigación o práctica profesional a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades.

CT11 - Identificar y seleccionar con rigor la metodología adecuada para formular hipótesis, definir problemas y diseñar estrategias de trabajo propias de la investigación incidiendo en el compromiso ético.

#### ESPECÍFICAS

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

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

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

### 1.12.2. Resultados de aprendizaje

No aplica.

### 1.12.3. Objetivos de la asignatura

El curso tiene como objetivos:

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

2. Aprender las bases teóricas de los métodos, proporcionando información sobre el método de onda plana-pseudopotencial y las técnicas de Transformada Rápida de Fourier.

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

3. Cálculo, utilizando métodos DFT, de propiedades moleculares de sistemas grandes, tanto para moléculas como para materiales.
4. Obtener una descripción teórica de la estructura electrónica que se puede utilizar para interpretar datos experimentales, predecir fenómenos interesantes y / o desarrollar nuevos conceptos teóricos.
5. Introducir la teoría de Valence Bond (VB).
6. Aprender a interpretar los resultados de diferentes cálculos de Valence Bond utilizando diferentes modelos orbitales.
7. Aprender Métodos multireferenciales.
8. Aprender a analizar la función de onda usando diferentes metodologías (AIM, ELF, NBO...).
9. Esbozar los principios básicos del enfoque del paquete de ondas dependiente del tiempo.
10. Conocer los fundamentos de la Dinámica Molecular clásica y los pasos para preparar los cálculos MD.
11. Enfoque de paquete de onda dependiente del tiempo: obtención de información de dispersión.
12. Visión general de las teorías de las velocidades de reacción: las propiedades básicas de las reacciones elementales obtenidas a partir de experimentos de cinética de reacción.
13. Conocer los métodos que combinan dinámicas clásicas con descripción cuántica de partes del sistema.
14. Conocer las técnicas que permiten acoplar el movimiento electrónico y nuclear.

### 1.13. Contenidos del programa

Bloque 1 - Métodos avanzados en estructura electrónica.

- Teoría del enlace de valencia.
- Correlación electrónica con métodos de función de onda multiconfiguracionales.
- Análisis de la función de ondas.
- Teoría Coupled - Cluster.

Bloque 2 - Dinámica y modelización molecular.

- Fuerzas intramoleculares.
- Dinámica molecular: fundamentos y simulación de fisisorción de gas.
- Enfoque de paquete de ondas dependiente del tiempo: obtención de información de dispersión.
- Dinámica molecular ab-initio: de la teoría a la aplicación.
- Esquemas QM/MM.

### 1.14. Referencias de consulta

- F Weinhold, C. R. Landis. Valency and Bonding: A Natural Bond Orbital Donor-Acceptor Perspective. (Cambridge Univ. Press. 2005)
- R. F. W. Bader. Atoms in Molecules. A quantum theory. /Cambridge Univ. Press. 1990).
- B. Silvi, A. Savin, Nature 371, 1994, 683.
- C. Gatti, P. Macchi, Eds. Modern Charge Density Analysis. (Springer 2012).
- Attila Szabo and Neil S. Ostlund, Modern Quantum Chemistry (Macmillan Publishing Co., Inc., 1982).
- Trygve U. Helgaker, Poul Jorgensen, and Jeppe Olsen, Molecular Electronic-Structure Theory (John Wiley & Sons Inc., Chichester, 2000).
- J. Stone "The Theory of Intermolecular Forces", Oxford University Press, 2º Ed. UK. 2013.
- "Computer simulations of liquids", M.P. Allen and D.J. Tildesley, (Oxford Science Publications, 2000).
- D. Marx, and J. Hutter, Ab Initio Molecular Dynamics: Theory and Implementation in Modern Methods and Algorithms of Quantum Chemistry (J. Grotendorst Ed., John von Neumann Institute for Computing, Julich, NIC Series, Vol. 1, pp. 301-449, 2000).

## 2. Metodologías docentes y tiempo de trabajo del estudiante

### 2.1. Presencialidad

Porcentaje de actividades presenciales (mínimo 33% del total).

### 2.2. Relación de actividades formativas

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

Porcentaje de actividades no presenciales.	
<b>Actividades presenciales</b>	<b>Nº horas</b>
Clases teóricas en aula	40
Prácticas con medios informáticos	40
Actividades de evaluación	2

### 3. Sistemas de evaluación y porcentaje en la calificación final

#### 3.1. Convocatoria ordinaria

La nota final de la asignatura se basará en: 20% examen final de la asignatura y un 80% correspondiente a la entrega de un informe de ejercicios propuestos por el profesor.

##### 3.1.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Examen final	20
Ejercicios propuestos	80

#### 3.2. Convocatoria extraordinaria

La evaluación se basará en la entrega de un informe con los ejercicios propuestos.

##### 3.2.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Ejercicios propuestos.	100
Evaluación continua	0

### 4. Cronograma orientativo

Cada año, la asignatura estará organizada por una de las universidades del consorcio. Para el curso 2021 - 2022, la encargada será la Universidad Paul Sabatier Toulouse III.

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





UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE MADRID

## 33425 - MÉTODOS TEÓRICOS PARA LA SIMULACIÓN DE MATERIALES

### Información de la asignatura

**Código - Nombre:** 33425 - MÉTODOS TEÓRICOS PARA LA SIMULACIÓN DE MATERIALES

**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

MÉTODOS TEÓRICOS PARA LA SIMULACIÓN DE MATERIALES

#### 1.2. Carácter

Optativa

#### 1.3. Nivel

Máster (MECES 3)

#### 1.4. Curso

2

#### 1.5. Semestre

762-Primer semestre o Segundo semestre

748-Primer semestre o Segundo semestre

621-Segundo semestre

#### 1.6. Número de créditos ECTS

6.0

#### 1.7. Idioma

Inglés

#### 1.8. Requisitos previos

No hay.

#### 1.9. Recomendaciones

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

No aplicable.

## 1.10. Requisitos mínimos de asistencia

La asistencia es obligatoria.

## 1.11. Coordinador/a de la asignatura

Manuel Alcamí Pertejo.

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

## 1.12. Competencias y resultados del aprendizaje

### 1.12.1. Competencias

#### BÁSICAS Y GENERALES

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.

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.

#### TRANSVERSALES

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

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

CT09 - Capacidad de obtener, seleccionar, elaborar y procesar información proveniente de fuentes diversas con criterios objetivos, priorizándolas según su calidad y pertinencia

CT10 - Predecir y controlar la evolución de situaciones complejas mediante el desarrollo de nuevas e innovadoras metodologías de trabajo adaptadas al ámbito científico/investigador y profesional

CT11 - Identificar y seleccionar con rigor la metodología adecuada para formular hipótesis, definir problemas y diseñar estrategias de trabajo propias de la investigación incidiendo en el compromiso ético

#### 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.

CE02 - Amplia y/o adquiere conocimiento de los métodos básicos de la Química Cuántica y evalúa críticamente su aplicabilidad.

CE19 - El/la estudiante está familiarizado con las técnicas computacionales que, basadas en la mecánica y dinámica molecular, son la base del diseño de moléculas de interés en campos tales como farmacología, petroquímica, etc.

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

### 1.12.2. Resultados de aprendizaje

No aplica.

### 1.12.3. Objetivos de la asignatura

El curso se centrará en el uso de técnicas de química teórica para describir las propiedades de nuevos materiales. Incluirá aspectos como el modelado de sistemas periódicos, superficies, nanotubos, materiales 2D como frameworks metal-orgánicos (COF), deposito de moléculas en superficies, auto-ensamblado, etc. Este tipo de simulación se encuentra en la frontera de la física y la química y muchas veces requiere combinar diferentes métodos computacionales para describir tanto el material como la parte activa del mismo y diferentes efectos como la transferencias de electrones. El curso presentará ejemplos para mostrar cómo aplicar diferentes modelos y también incluirá aspectos como el diseño de materiales utilizando técnicas de machine learning.

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

### 1.13. Contenidos del programa

#### Bloque teórico

1. Nanomateriales: perspectiva desde la física y la química.
2. Teoría de sólidos.
3. Diseño de materiales específicos.
4. Semiconductores orgánicos para optoelectrónica.
5. Interfases organo-inorgánicas.
6. Grafeno y materiales 2D.
7. Funcionalización del grafeno y puntos de carbono.

#### Bloque práctico

1. VASP
2. Descubriendo y diseñando materiales de alto rendimiento.
3. Mecánica molecular/ Simulación dinámica de materiales moleculares.
4. Cálculos DFT no periódicos de materiales y superficies.

### 1.14. Referencias de consulta

- A Computational Chemistry of Solid State Materials. Ronald Hoffmann. Wiley-VCH.
- Electronic structure. Basic Theory and Practical Methods. Richard M. Martin.
- Fundamentals of Condensed Matter Physics. Marvin L. Cohen and Steven G. Louie.

## 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	20
Prácticas con medios informáticos	20
Actividades de evaluación	3

## 3. Sistemas de evaluación y porcentaje en la calificación final

---

### 3.1. Convocatoria ordinaria

La nota final de la asignatura se basará en: 20% examen final de la asignatura y un 80% correspondiente a la entrega de un informe de ejercicios propuestos por el profesor.

#### 3.1.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Examen final	20

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	

Ejercicios propuestos	80
-----------------------	----

### 3.2. Convocatoria extraordinaria

La evaluación se basará en la entrega de un informe con los ejercicios propuestos.

#### 3.2.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Ejercicios propuestos.	100
Evaluación continua	0

### 4. Cronograma orientativo

La asignatura está organizada por la Universidad Autónoma de Madrid.

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



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE MADRID

## 33424 - MULTIESCALA, MACHINE LEARNING Y MÉTODOS QSAR APLICADOS A BIOMOLÉCULAS

### Información de la asignatura

**Código - Nombre:** 33424 - MULTIESCALA, MACHINE LEARNING Y MÉTODOS QSAR APLICADOS A BIOMOLÉCULAS

**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

MULTIESCALA, MACHINE LEARNING Y MÉTODOS QSAR APLICADOS A BIOMOLÉCULAS.

#### 1.2. Carácter

Optativa

#### 1.3. Nivel

Máster (MECES 3)

#### 1.4. Curso

2

#### 1.5. Semestre

Segundo semestre

#### 1.6. Número de créditos ECTS

6.0

#### 1.7. Idioma

Inglés

#### 1.8. Requisitos previos

No hay.

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

## 1.9. Recomendaciones

No aplica.

## 1.10. Requisitos mínimos de asistencia

La asistencia a clases es obligatoria.

## 1.11. Coordinador/a de la asignatura

Noelia Faginas Lago (Universidad de Perugia).

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

## 1.12. Competencias y resultados del aprendizaje

### 1.12.1. Competencias

#### BÁSICAS Y GENERALES

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.

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

CB10 - Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida auto dirigido o autónomo.

#### TRANSVERSALES

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

CT09 - Capacidad de obtener, seleccionar, elaborar y procesar información proveniente de fuentes diversas con criterios objetivos, priorizándolas según su calidad y pertinencia.

CT10 - Predecir y controlar la evolución de situaciones complejas mediante el desarrollo de nuevas e innovadoras metodologías de trabajo adaptadas al ámbito científico/investigador y profesional

CT11 - Identificar y seleccionar con rigor la metodología adecuada para formular hipótesis, definir problemas y diseñar estrategias de trabajo propias de la investigación incidiendo en el compromiso ético

#### ESPECÍFICAS

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.

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

CE19 - El/la estudiante está familiarizado con las técnicas computacionales que, basadas en la mecánica y dinámica molecular, son la base del diseño de moléculas de interés en campos tales como farmacología, petroquímica, etc.

### 1.12.2. Resultados de aprendizaje

No aplica.

### 1.12.3. Objetivos de la asignatura

El objetivo de este curso es proporcionar a los estudiantes los conocimientos básicos de técnicas de aprendizaje automático y métodos QSAR (Quantitative Structure-Activity Relationship) aplicados a sistemas moleculares de pequeño y gran tamaño, tales como reactivos simples o biomoléculas.

El Machine Learning (ML) permite a los equipos solucionar problemas aprendiendo de los datos. En los últimos años el ML se ha aplicado, cada vez más, a una amplia variedad de desafíos químicos, desde la mejora de la química computacional hasta el diseño de medicamentos y materiales e incluso la planificación de síntesis. Esta curso nace con el propósito de introducir esta realidad de rápido crecimiento.

## 1.13. Contenidos del programa

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

1. Introducción al Cloud Computing.
2. Virtualización y arquitecturas contenedoras.
3. Servicios de gestión del Big Data y despliegues automáticos.
4. Clasificación binaria de proteínas mediante enfoque del Machine learning.
5. Modelado multiescala de procesos bioquímicos.
6. Dinámica Molecular de alto rendimiento: teoría y aplicaciones.
7. Introducción al Deep learning y al Tensorflow.
8. Dinámica molecular multiescala de biomoléculas.
9. Posibilidades del Machine learning.
10. Métodos QSAR aplicados a biomoléculas.

### 1.14. Referencias de consulta

Combined Quantum Mechanics/Molecular Mechanics (QM/MM) Methods in Computational Enzymology M.W. van der Kamp and A. J. Mulholland Biochemistry 2013.

QM/MM Methods for Biomolecular Systems H. M. Senn and W. Thiel (2009), QM/MM Methods for Biomolecular Systems. Angewandte Chemie Int. Ed. 2009.

A Hybrid Potential Reaction Path and Free Energy Study of the Chorismate Mutase Reaction S. Martí, J. A., V. Moliner, E. Silla, I. Tuñón, J. Bertrán, and M. J. Field Journal of the American Chemical Society 2001.

## 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	20
Prácticas con medios informáticos	20
Actividades de evaluación	3

## 3. Sistemas de evaluación y porcentaje en la calificación final

### 3.1. Convocatoria ordinaria

La nota final de la asignatura se basará en: 20% examen final de la asignatura y un 80% correspondiente a la entrega de un informe de ejercicios propuestos por el profesor.

#### 3.1.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Examen final	20
Ejercicios propuestos	80

### 3.2. Convocatoria extraordinaria

La evaluación se basará en la entrega de un informe con los ejercicios propuestos.

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

### 3.2.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Ejercicios propuestos.	100
Evaluación continua	0

### 4. Cronograma orientativo

El curso lo organizará la Universidad de Perugia.

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





UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE MADRID

## 33426 - PROYECTO DE PROGRAMACIÓN DE QUÍMICA COMPUTACIONAL

### Información de la asignatura

**Código - Nombre:** 33426 - PROYECTO DE PROGRAMACIÓN DE QUÍMICA COMPUTACIONAL

**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

PROYECTO DE PROGRAMACIÓN DE QUÍMICA COMPUTACIONAL

#### 1.2. Carácter

Optativa

#### 1.3. Nivel

Máster (MECES 3)

#### 1.4. Curso

2

#### 1.5. Semestre

Segundo semestre

#### 1.6. Número de créditos ECTS

6.0

#### 1.7. Idioma

Inglés

#### 1.8. Requisitos previos

No hay.

#### 1.9. Recomendaciones

No hay.

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

## 1.10. Requisitos mínimos de asistencia

La asistencia a clases es obligatoria.

## 1.11. Coordinador/a de la asignatura

Jeremy Harvey (Universidad Católica de Lovaina).

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

## 1.12. Competencias y resultados del aprendizaje

---

### 1.12.1. Competencias

Básicas y Generales

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.

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.

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 auto dirigido o autónomo.

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

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

CT05 - Capacidad de razonamiento y reflexión crítica y autocrítica como vía para mejorar el propio proceso de aprendizaje y la generación y desarrollo de ideas en un contexto profesional o de investigación.

CT11 - Identificar y seleccionar con rigor la metodología adecuada para formular hipótesis, definir problemas y diseñar estrategias de trabajo propias de la investigación incidiendo en el compromiso ético

CT13 - Capacidad de asumir la responsabilidad del propio desarrollo profesional, de acuerdo a los retos y oportunidades que plantea la sociedad

#### 5.5.1.5.3 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.

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

CE19 - El/la estudiante está familiarizado con las técnicas computacionales que, basadas en la mecánica y dinámica molecular, son la base del diseño de moléculas de interés en campos tales como farmacología, petroquímica, etc.

### 1.12.2. Resultados de aprendizaje

No procede.

### 1.12.3. Objetivos de la asignatura

El objetivo de este curso es aprender algunas técnicas básicas de programación y programación paralela, que son relevantes para muchos problemas de química computacional. Durante la clase, el estudiante aprenderá o reforzará sus conocimientos de un lenguaje de programación compilado (típicamente Fortran o C++), e implementará desde cero un programa básico (y quizás más avanzado) para simulaciones de dinámica molecular de partículas Lennard-Jones, así como desarrollar y probar una versión paralela de este código (usando OpenMP o MPI).

## 1.13. Contenidos del programa

Cada curso se adaptará para ofrecer un proyecto de programación en el que se exigirá unos requisitos mínimos del código que se programe como por ejemplo que el código pueda correr en paralelo. Para ello se darán nociones de Monte Carlo, Dinámica Molecular, Fortran, C, C++, Python, así como OpenMP y MPI. El estudiante decidirá cómo desarrollar su código con las herramientas que tiene y a partir de ahí tendrá un seguimiento por parte del coordinador del curso.

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

## 1.14. Referencias de consulta

No procede.

## 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	20
Prácticas con medios informáticos	20
Actividades de evaluación	3

## 3. Sistemas de evaluación y porcentaje en la calificación final

---

### 3.1. Convocatoria ordinaria

La nota final de la asignatura se basará en: 20% examen final de la asignatura y un 80% correspondiente a la entrega de un informe de ejercicios propuestos por el profesor.

#### 3.1.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Examen final	20
Ejercicios propuestos	80

### 3.2. Convocatoria extraordinaria

La evaluación se realizará mediante la entrega de un informe con los ejercicios propuestos por el profesor.

#### 3.2.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Ejercicios propuestos.	100
Evaluación continua	0

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

#### 4. Cronograma orientativo

La asignatura será organizada por la Universidad de Lovaina.

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



## 31236 - TÉCNICAS COMPUTACIONALES AVANZADAS

### Información de la asignatura

**Código - Nombre:** 31236 - TÉCNICAS COMPUTACIONALES AVANZADAS

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

#### 1.2. Carácter

616 - Obligatoria  
762 - Optativa  
651 - Obligatoria  
748 - Optativa  
751 - Obligatoria

#### 1.3. Nivel

Máster (MECES 3)

#### 1.4. Curso

2

#### 1.5. Semestre

Anual

#### 1.6. Número de créditos ECTS

6.0

#### 1.7. Idioma

Inglés

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

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

## 1.12. Competencias y resultados del aprendizaje

---

### 1.12.1. Competencias

#### BÁSICAS Y GENERALES:

CB6 - Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación. CB7 - Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.

CB8 - Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios.

CB9 - Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades.

CB10 - Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.

CG01 - Los estudiantes son capaces de fomentar, en contextos académicos y profesionales, el avance tecnológico y científico dentro de una sociedad basada en el conocimiento y en el respeto a: a) los derechos fundamentales y de igualdad de oportunidades entre hombres y mujeres, b) los principios de igualdad de oportunidades y accesibilidad universal de las personas con discapacidad y c) los valores propios de una cultura de paz y de valores democráticos.

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

#### TRANSVERSALES:

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

#### ESPECÍFICAS:

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

### 1.12.2. Resultados de aprendizaje

Resultados del aprendizaje:

- Plantear o reconocer la ecuación de Schödinger de sistemas modelo en presencia de condiciones externas para plantear su resolución con medios informáticos.
- Saber utilizar redes de computo de altas prestaciones en Red Deslocalizada (Grid o similares).
- Conocer al menos una biblioteca ("library") de rutinas de cálculo numérico paralelo usando algún problema como referencia (por ejemplo, sistemas magnéticos).
- Conocer las bases de la computación cuántica y su aplicación a Química Teórica

### 1.12.3. Objetivos de la asignatura

-

## 1.13. Contenidos del programa

- Computación en Grid
- Técnicas de paralelización masiva: memoria compartida y memoria distribuida

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

- Utilización de librerías matemáticas masivamente paralelas.
- Computación Cuántica

### 1.14. Referencias de consulta

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

## 2. Metodologías docentes y tiempo de trabajo del estudiante

### 2.1. Presencialidad

	#horas
Porcentaje de actividades presenciales (mínimo 33% del total)	42
Porcentaje de actividades no presenciales	108

### 2.2. Relación de actividades formativas

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

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

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

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

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

## 3. Sistemas de evaluación y porcentaje en la calificación final

### 3.1. Convocatoria ordinaria

La nota final de la asignatura se basará en:

- 60% Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura.
- 40% Discusión en tutorías y/o seminarios sobre los ejercicios, trabajos o prácticas realizadas en la asignatura.

#### 3.1.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de Evaluación	%
Entrega de ejercicios de la asignatura o de informe crítico.	60
Discusión en tutorías y/o seminarios sobre los ejercicios, trabajos o prácticas.	40

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	

### 3.2. Convocatoria extraordinaria

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

#### 3.2.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Entrega de ejercicios	100

### 4. Cronograma orientativo

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

Toda la información del curso está disponible en la página web del máster: [www.emtccm.org](http://www.emtccm.org)

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





UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE MADRID

## 31239 - TESIS DE MÁSTER

### Información de la asignatura

**Código - Nombre:** 31239 - TESIS DE MÁSTER

**Titulación:** 616 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2013)  
621 - ESTUDIOS INTERUNIVERSITARIOS MÁSTER  
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

Trabajo fin de Máster

#### 1.2. Carácter

616 - Obligatoria  
762 - Trabajo fin de máster  
651 - Trabajo fin de máster  
748 - Trabajo fin de máster  
621 - Trabajo fin de máster  
751 - Trabajo fin de máster

#### 1.3. Nivel

616 - Máster (MECES 3)  
762 - Máster (MECES 3)  
651 - Máster (MECES 3)  
748 - Máster (MECES 3)  
621 - Máster  
751 - Máster (MECES 3)

#### 1.4. Curso

751 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional Europeo: 2  
651 - Máster Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelización Computacional: 2  
621 - ESTUDIOS INTERUNIVERSITARIOS MÁSTER: 1  
762 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2021): 2  
616 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2013): 2  
748 - Máster Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelización Computacional: 2

#### 1.5. Semestre

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

A anual

## 1.6. Número de créditos ECTS

30.0

## 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

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.

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.

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.

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

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

relacionadas con la Química Teórica y Modelización Computacional.

CE02 - Amplía y/o adquiere conocimiento de los métodos básicos de la Química Cuántica y evalúa críticamente su aplicabilidad.

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 químicos físicos, en bases de datos de cálculos moleculares, en base de datos bibliográficas científicas y en la lectura crítica de trabajos científicos.

CE06 - Es capaz de realizar una contribución a través de una investigación original que amplíe las fronteras del conocimiento en simulación Química, desarrollando un corpus sustancial, que merezca, al menos en parte, la publicación referenciada a nivel nacional. 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.

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.

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.

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.

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.

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

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

CE19 - El/la estudiante está familiarizado con las técnicas computacionales que, basadas en la mecánica y dinámica molecular, son la base del diseño de moléculas de interés en campos tales como farmacología, petroquímica, etc.

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

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

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

Las competencias específicas entre CE23-CE28, están asociadas al módulo optativo. Ellas son:

CE23 - Los estudiantes tienen conocimientos tanto a nivel de usuario como de administrador de sistemas complejos de cálculo basados en UNIX/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.

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.

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

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.

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.

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

### 1.12.2. Resultados de aprendizaje

-

### 1.12.3. Objetivos de la asignatura

-

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

### 1.13. Contenidos del programa

Diseño, planificación y desarrollo de un proyecto de investigación original.

### 1.14. Referencias de consulta

Referencias bibliográficas sugeridas por el director de Trabajo de Fin de Máster.

## 2. Metodologías docentes y tiempo de trabajo del estudiante

---

### 2.1. Presencialidad

	#horas
Porcentaje de actividades presenciales (mínimo 33% del total)	300
Porcentaje de actividades no presenciales	450

### 2.2. Relación de actividades formativas

Actividades presenciales	Nº horas
Clases teóricas en aula	
Seminarios	46
Clases prácticas en aula	
Prácticas clínicas	
Prácticas con medios informáticos	
Prácticas de campo	
Prácticas de laboratorio	
Prácticas externas y/o practicum	
Trabajos académicamente dirigidos	4
Tutorías	20
Actividades de evaluación	
Otras	230 (Estancia en una universidad externa)

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

**Presentaciones** orales de temas previamente preparados, incluyendo debate con compañeros y profesores.

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

**Seguimiento** del Trabajo de Fin de Máster.

Participación activa en tareas que permitan el desarrollo de destrezas comunicativas.

## 3. Sistemas de evaluación y porcentaje en la calificación final

---

### 3.1. Convocatoria ordinaria

100% Realización y defensa pública y oral ante un tribunal evaluador del informe escrito sobre el trabajo de investigación original realizado por el estudiante.

#### 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

100% Realización y defensa pública y oral ante un tribunal evaluador del informe escrito sobre el trabajo de investigación

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

original realizado por el estudiante.

### 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

-

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