

**CURSO DE LENGUA EUROPEA (INGLÉS)****1.- Datos de la Asignatura**

Código	303140	Plan		ECTS	5.0
Carácter	Obligatoria	Curso	1	Periodicidad	
Área	Filología Inglesa				
Departamento	Filología Inglesa				
Plataforma Virtual	Plataforma:				
	URL de Acceso:				

**Datos del profesorado**

Profesor Coordinador	Elvira Pérez Iglesias	Grupo / s	
Departamento	Filología Inglesa		
Área	Filología Inglesa		
Centro			
Despacho			
Horario de tutorías	A decidir en función de horarios		
URL Web			
E-mail		Teléfono	

**2.- Sentido de la materia en el plan de estudios**

Bloque formativo al que pertenece la materia
Módulo 1: Fundamentos
Papel de la asignatura dentro del Bloque formativo y del Plan de Estudios.
Perfil profesional.

### 3.- Recomendaciones previas

--

### 4.- Objetivos de la asignatura

Completar o adquirir la capacidad de oral y escrita necesaria para leer textos científicos en inglés y seguir clases explicadas por no nativos.  
Se busca que esta asignatura garantice un nivel mínimo de conocimiento de una lengua extranjera (inglés), que permita a los estudiantes seguir el Máster con normalidad.

### 5.- Contenidos

Algoritmos y Programación.  
Programación FORTRAN.  
Cálculo matricial.  
Cálculo Integral.  
Búsqueda de ceros y optimización de funciones.  
Análisis multivariante.

### 6.- Competencias a adquirir

#### Específicas.

- El estudiante tiene capacidad de generar nuevas ideas.
- El estudiante debe ser capaz de desenvolverse oralmente, en una lengua extranjera, en diferentes contextos de la vida cotidiana.
- El estudiante debe ser capaz de mantener una conversación en una lengua extranjera, normalmente inglés, y se expresa correctamente tanto en forma oral como escrita.

#### Básicas/Generales.

- 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

#### Transversales.

- El estudiante es capaz de trabajar en equipo tanto a nivel multidisciplinar como con sus propios pares.
- El estudiante es organizado en el trabajo y sabe gestionar el tiempo.
- Conocimiento de una lengua extranjera.
- El estudiante posee razonamiento crítico.

### 7.- Metodologías docentes

**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.

**Prácticas en el aula:** Formulación, análisis, resolución y debate de un problema o ejercicio, relacionado con la temática de la asignatura.

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

**8.- Previsión de distribución de las metodologías docentes**

		Horas dirigidas por el profesor		Horas de trabajo autónomo	HORAS TOTALES
		Horas presenciales.	Horas no presenciales.		
Sesiones magistrales		18		27	45
Prácticas	- En aula	18		12	30
	- En el laboratorio				
	- En aula de informática				
	- De campo				
	- De visualización (visu)				
Seminarios					
Exposiciones y debates		7		11	18
Tutorías		4		6	10
Actividades de seguimiento online					
Preparación de trabajos					
Otras actividades (detallar)					
Exámenes		3		5	8
TOTAL		<b>50</b>		<b>61</b>	<b>111</b>

### 9.- Recursos

Libros de consulta para el alumno

Otras referencias bibliográficas, electrónicas o cualquier otro tipo de recurso.

### 10.- Evaluación

Consideraciones Generales

Criterios de evaluación

**Convocatoria ordinaria.**

E02 10%

E03 20%

E07 60%

E11 10%

**Convocatoria extraordinaria**

E02 10%

E03 20%

E07 60%

E11 10%

Instrumentos de evaluación

E01. Asistencia y participación en las clases magistrales. E02. Realización de controles (tests) a lo largo del curso.

E03. Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura. E04. Discusión en tutorías y seminarios sobre los ejercicios, trabajos o prácticas realizadas en la asignatura.

E05. Evaluación continua del alumno mediante preguntas y cuestiones orales durante el desarrollo de las prácticas E06. Realización y defensa de un informe sobre los casos prácticos planteados por el profesor en clase.  
E07. Realización de un examen escrito al final del curso  
E08. Realización de un examen de carácter práctico al final del curso.  
E10. Realización y defensa pública y oral ante un tribunal evaluador del informe escrito sobre el trabajo de investigación original realizado por el estudiante.  
E11. Examen parcial.

**Recomendaciones para la evaluación.**

**Recomendaciones para la recuperación.**

**FUNDAMENTOS MATEMÁTICOS DE LA MECÁNICA CUÁNTICA****1.- Datos de la Asignatura**

Código	303141	Plan		ECTS	5.0
Carácter	Obligatoria	Curso	1	Periodicidad	
Área	Química Física				
Departamento	Química Física				
Plataforma Virtual	Plataforma:	Moodle			
	URL de Acceso:	<a href="http://www.uam.es/moodle">http://www.uam.es/moodle</a>			

**Datos del profesorado**

Profesor Coordinador	M <sup>a</sup> Dolores González Sánchez	Grupo / s	
Departamento	Química Física		
Área	Química Física		
Centro	Facultad de Ciencias Química		
Despacho	C3501		
Horario de tutorías	A decidir en función de horarios		
URL Web			
E-mail	lgonsan@usal.es	Teléfono	923294485

Profesor	Manuel Alcamí Pertejo	Grupo / s	
Departamento	Departamento de Química		
Área			
Centro	Universidad Autónoma de Madrid		
Despacho	Módulo 13-604		
Horario de tutorías	Contactar por email		
URL Web	<a href="http://www.um.es/web/quimica-fisica/">http://www.um.es/web/quimica-fisica/</a>		
E-mail	manuel.alcami@uam.es	Teléfono	91 497 3857.

Profesor	Juan Carlos Paniagua Valle	Grupo / s	
Departamento	Departamento de Química Física		
Área			
Centro	Universidad de Barcelona		
Despacho	415		
Horario de tutorías	Contactar por email		
URL Web	<a href="http://www.ub.edu/dept-qp/grups/juanca/juanca.html">http://www.ub.edu/dept-qp/grups/juanca/juanca.html</a>		
E-mail	jpaniagua@ub.edu	Teléfono	93 4020474

## 2.- Sentido de la materia en el plan de estudios

Bloque formativo al que pertenece la materia
Módulo 1: Fundamentos
Papel de la asignatura dentro del Bloque formativo y del Plan de Estudios.
Perfil profesional.

## 3.- Recomendaciones previas

--

## 4.- Objetivos de la asignatura

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

## 5.- Contenidos

Primera Parte

- 1- Introducción. Solución de la ecuación de Schrödinger para casos sencillos
- 2- Algebra básica

- 3- Espacios funcionales.
- 4- Métodos aproximados en Química Cuántica: Principio Variacional y Teoría de Perturbaciones independiente del tiempo
- 5- Partículas independientes e idénticas
- 6- Momento Angular, spin.
- 7- Teoremas principales de la Mecánica Cuántica
- 8- Composición de momentos angulares.

Segunda Parte

- 9- Postulados de la mecánica cuántica.
- 10- Segunda cuantización
11. Estados puros y estados mezcla
12. Observables compatibles e incompatibles
13. Medida de observables discretos y continuos
14. Operadores de densidad
15. Medidas en estados mezcla
16. Imágenes de evolución temporal
17. Teoría de perturbaciones dependientes del tiempo
18. Sistemas compuestos. Correlación y entrelazamiento
19. Representaciones discretas. Cambios de base
20. Representaciones de posiciones y de momentos
21. Operadores y matrices de densidad reducidos. Espinorbitales naturales

**6.- Competencias a adquirir**

<b>Específicas.</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>- El estudiante demuestra su conocimiento y comprensión de los hechos aplicando conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química Teórica y Modelización Computacional.</li> <li>- Comprender los fundamentos teóricos y prácticos de técnicas con las que puede analizar la estructura electrónica, morfo- lógica y estructural de un compuesto.</li> <li>- El estudiante está familiarizado con los postulados fundamentales de la Mecánica Cuántica necesarios para un buen entendimiento de los métodos más comunes utilizados en química cuántica.</li> <li>- El estudiante comprende y maneja las herramientas matemáticas requeridas para el desarrollo de la Química Teórica en sus aspectos fundamentales y sus aplicaciones.</li> </ul>
<b>Básicas/Generales.</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>- 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</li> <li>- 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</li> <li>- 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</li> <li>- 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</li> <li>- 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.</li> <li>- Los estudiantes deben ser 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.</li> </ul>
<b>Transversales.</b>
<p>El estudiante es capaz de adaptarse a diferentes entornos culturales.</p> <p>El estudiante es capaz de resolver problemas y tomar decisiones.</p> <p>El estudiante es capaz de trabajar en equipo tanto a nivel multidisciplinar como con sus propios pares.</p> <p>El estudiante es organizado en el trabajo y sabe gestionar el tiempo.</p>

## 7.- Metodologías docentes

**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 (<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.

**8.- Previsión de distribución de las metodologías docentes**

		Horas dirigidas por el profesor		Horas de trabajo autónomo	HORAS TOTALES
		Horas presenciales.	Horas no presenciales.		
Sesiones magistrales		37		56	93
Prácticas	- En aula				
	- En el laboratorio				
	- En aula de informática				
	- De campo				
	- De visualización (visu)				
Seminarios		13		19	32
Exposiciones y debates					
Tutorías					
Actividades de seguimiento online					
Preparación de trabajos					
Otras actividades (detallar)					
Exámenes					
TOTAL		50		75	125

## 9.- Recursos

### Libros de consulta para el alumno

#### 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)

**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)

Otras referencias bibliográficas, electrónicas o cualquier otro tipo de recurso.

**10.- Evaluación**

Consideraciones Generales

**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% ejercicios, trabajos y discusión de los mismos que se irá realizando durante el curso.
- 40% examen.

**Convocatoria extraordinaria**

Se realizará un examen final único que será de carácter teórico y que abarcará los contenidos de toda la asignatura. Además 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:

- 60% ejercicios, trabajos y discusión de los mismos.
- 40% examen

Criterios de evaluación
Instrumentos de evaluación
Recomendaciones para la evaluación.
Recomendaciones para la recuperación.

**MECÁNICA ESTADÍSTICA Y APLICACIONES EN SIMULACIÓN****1.- Datos de la Asignatura**

Código	303142	Plan		ECTS	5.0
Carácter	Obligatoria	Curso	1	Periodicidad	
Área	Química Física				
Departamento	Química Física				
Plataforma Virtual	Plataforma:	Moodle			
	URL de Acceso:	<a href="http://moodle.usal.es">http://moodle.usal.es</a>			

**Datos del profesorado**

Profesor Coordinador	M <sup>a</sup> Dolores González Sánchez	Grupo / s	
Departamento	Química Física		
Área	Química Física		
Centro	Facultad de Ciencias Química		
Despacho	C3501		
Horario de tutorías	A decidir en función de horarios		
URL Web			
E-mail	lgonsan@usal.es	Teléfono	923294485

Profesor	Miguel Angel Aguilar Espinosa	Grupo / s	
Departamento	Departamento de Ingeniería Química y Química Física		
Área			
Centro	Universidad de Extremadura		
Despacho			
Horario de tutorías	10:00-14:00		
URL Web			
E-mail	maguilar@unex.es	Teléfono	924289300 Ext:86126

Profesor	Saulo Vázquez	Grupo / s	
Departamento	Departamento de Química		
Área			
Centro	Universidad de Santiago de Compostela		
Despacho			
Horario de tutorías	Contactar por email		
URL Web	<a href="http://www.usc.es/ciqus/en/groups/chemical-dynamics-simulations">http://www.usc.es/ciqus/en/groups/chemical-dynamics-simulations</a>		
E-mail	saulo.vazquez@usc.es	Teléfono	8818 15709

Profesor	Néstor Aguirre	Grupo / s	
Departamento	Departamento de Química		
Área			
Centro	Universidad Autónoma de Madrid		
Despacho			
Horario de tutorías	Contactar por email		
URL Web	<a href="http://campusys.qui.uam.es/?page_id=403">http://campusys.qui.uam.es/?page_id=403</a>		
E-mail	Nestor.aguirre@uam.es	Teléfono	914972573

## 2.- Sentido de la materia en el plan de estudios

Bloque formativo al que pertenece la materia
Módulo 1: Fundamentos
Papel de la asignatura dentro del Bloque formativo y del Plan de Estudios.
Perfil profesional.

## 3.- Recomendaciones previas

--

#### 4.- Objetivos de la asignatura

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.

Como aplicaciones los alumnos calcularán, haciendo uso de la información obtenida de programas de Química cuántica, las correcciones entálpicas y entrópicas a diferencias de energías libres en distintas situaciones de interés químico. Además, analizarán la estructura y propiedades termodinámicas de líquidos empleando métodos de simulación.

#### 5.- Contenidos

##### 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.

##### 2- Aplicaciones

- Método Monte Carlo
- Cálculo de propiedades termodinámicas y estructurales
- Aspectos prácticos de la simulación por ordenador

#### 6.- Competencias a adquirir

<b>Específicas.</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>- El estudiante demuestra su conocimiento y comprensión de los hechos aplicando conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química Teórica y Modelización Computacional.</li> <li>- Comprender los fundamentos teóricos y prácticos de técnicas con las que puede analizar la estructura electrónica, morfo- lógica y estructural de un compuesto.</li> <li>- El estudiante comprende la base de la Mecánica Estadística formulada a partir de las colectividades.</li> <li>- El estudiante debe saber calcular funciones de partición y aplicar las estadísticas cuánticas y la clásica a los sistemas ideales de interés en Química.</li> </ul>
<b>Básicas/Generales.</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>- 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</li> <li>- 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</li> <li>- 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</li> <li>- 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</li> <li>- 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.</li> <li>- Los estudiantes deben ser 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.</li> </ul>
<b>Transversales.</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>- El estudiante es capaz de adaptarse a diferentes entornos culturales.</li> <li>- El estudiante es capaz de resolver problemas y tomar decisiones.</li> </ul>

## 7.- Metodologías docentes

**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 (<http://www.uam.es/moodle>). 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.

**8.- Previsión de distribución de las metodologías docentes**

		Horas dirigidas por el profesor		Horas de trabajo autónomo	HORAS TOTALES
		Horas presenciales.	Horas no presenciales.		
Sesiones magistrales		25		40	65
Prácticas	- En aula				
	- En el laboratorio				
	- En aula de informática				
	- De campo				
	- De visualización (visu)				
Seminarios		10		20	30
Exposiciones y debates					
Tutorías					
Actividades de seguimiento online					
Preparación de trabajos				30	30
Otras actividades (detallar)					
Exámenes					
TOTAL		<b>35</b>		<b>90</b>	<b>125</b>

## 9.- Recursos

### Libros de consulta para el alumno

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, (Spriger-Verlag, Heidelberg) 1992

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

Otras referencias bibliográficas, electrónicas o cualquier otro tipo de recurso.

## 10.- Evaluación

### Consideraciones Generales

#### 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,

### **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

Criterios de evaluación

Instrumentos de evaluación

Recomendaciones para la evaluación.

Recomendaciones para la recuperación.

**MÉTODOS DE QUÍMICA TEÓRICA I****1.- Datos de la Asignatura**

Código	303145	Plan		ECTS	5.0
Carácter	Obligatoria	Curso	1	Periodicidad	
Área	Química Física				
Departamento	Química Física				
Plataforma Virtual	Plataforma:	Moodle			
	URL de Acceso:	http://moodle.usal.es			

**Datos del profesorado**

Profesor Coordinador	M <sup>a</sup> Dolores González Sánchez	Grupo / s	
Departamento	Química Física		
Área	Química Física		
Centro	Facultad de Ciencias Química		
Despacho	C3501		
Horario de tutorías	A decidir en función de horarios		
URL Web			
E-mail	lgonsan@usal.es	Teléfono	923294485

Profesor	Víctor Rayón	Grupo / s	
Departamento	Departamento de Química		
Área			
Centro	Universidad de Valladolid		
Despacho			
Horario de tutorías	10:00-14:00		
URL Web			
E-mail	vmrr@qf.uva.es	Teléfono	983184017

Profesor	Manuel Yáñez	Grupo / s	
Departamento	Departamento de Química		
Área			
Centro	Universidad Autónoma de Madrid		
Despacho	Modulo 13- 607		
Horario de tutorías	Contactar por email		
URL Web			
E-mail	Manuel.yanez@uam.es	Teléfono	914974953

## 2.- Sentido de la materia en el plan de estudios

Bloque formativo al que pertenece la materia
Módulo 2: Métodos
Papel de la asignatura dentro del Bloque formativo y del Plan de Estudios.
Perfil profesional.

## 3.- Recomendaciones previas

--

## 4.- Objetivos de la asignatura

<p>Después de cursar la asignatura los alumnos deberá estar en capacidad de:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- 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.</li> <li>- Entender los principios básicos de las metodologías "ab initio" y Teoría de los Funcionales de la Densidad.</li> <li>- Discernir entre los diferentes métodos existentes y cómo seleccionar el más adecuado para cada problema.</li> <li>- Demostrar su conocimiento y comprensión de los hechos aplicando conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química Teórica y Modelización Computacional.</li> </ul>
--

## 5.- Contenidos

### 1. Métodos Ab initio:

- Método de Hartree-Fock: RHF y UHF
- Funciones de base, pseudopotenciales y potenciales efectivos.
- Visión general de métodos no perturbacionales basados en función de onda: Métodos de interacción de configuraciones, Métodos Coupled Cluster, Métodos Multiconfiguracionales
- Teoría de perturbaciones Moller-Plesset

### 2. Teoría del Funcional de la Densidad:

- Conceptos preliminares. Teoremas de Hohenberg-Kohn.
- Método de Kohn-Sham.
- Aproximaciones al potencial de intercambio-correlación
- DFT conceptual

En la parte de Métodos de la Química Cuántica se cubre los teoremas fundamentales en los que se basan los métodos y 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. 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.

## 6.- Competencias a adquirir

<b>Específicas.</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>- El estudiante demuestra su conocimiento y comprensión de los hechos aplicando conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química Teórica y Modelización Computacional.</li> <li>- Comprender los fundamentos teóricos y prácticos de técnicas con las que puede analizar la estructura electrónica, morfológica y estructural de un compuesto.</li> <li>- El estudiante está familiarizado con los postulados fundamentales de la Mecánica Cuántica necesarios para un buen entendimiento de los métodos más comunes utilizados en química cuántica.</li> <li>- El estudiante es capaz de discernir entre los diferentes métodos existentes y cómo seleccionar el más adecuado para cada problema.</li> </ul>
<b>Básicas/Generales.</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>- 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</li> <li>- 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</li> <li>- 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</li> <li>- 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</li> <li>- 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.</li> <li>- Los estudiantes deben ser 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.</li> </ul>
<b>Transversales.</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>- El estudiante es capaz de adaptarse a diferentes entornos culturales.</li> <li>- El estudiante es capaz de resolver problemas y tomar decisiones.</li> </ul>

## 7.- Metodologías docentes

**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 (<http://www.uam.es/moodle>). 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.

**8.- Previsión de distribución de las metodologías docentes**

		Horas dirigidas por el profesor		Horas de trabajo autónomo	HORAS TOTALES
		Horas presenciales.	Horas no presenciales.		
Sesiones magistrales		20		40	65
Prácticas	- En aula				
	- En el laboratorio				
	- En aula de informática				
	- De campo				
	- De visualización (visu)				
Seminarios		15		20	30
Exposiciones y debates					
Tutorías					
Actividades de seguimiento online					
Preparación de trabajos				30	30
Otras actividades (detallar)					
Exámenes					
TOTAL		<b>35</b>		<b>90</b>	<b>125</b>

## 9.- Recursos

### Libros de consulta para el alumno

- 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.

Otras referencias bibliográficas, electrónicas o cualquier otro tipo de recurso.

## 10.- Evaluación

### Consideraciones Generales

#### 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.

**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.

Criterios de evaluación

Instrumentos de evaluación

Recomendaciones para la evaluación.

Recomendaciones para la recuperación.

**MÉTODOS DE QUÍMICA TEÓRICA II****1.- Datos de la Asignatura**

Código	303146	Plan		ECTS	5.0
Carácter	Obligatoria	Curso	1	Periodicidad	
Área	Química Física				
Departamento	Química Física				
Plataforma Virtual	Plataforma:	Moodle			
	URL de Acceso:	<a href="http://moodle.usal.es">http://moodle.usal.es</a>			

**Datos del profesorado**

Profesor Coordinador	M <sup>a</sup> Dolores González Sánchez	Grupo / s	
Departamento	Química Física		
Área	Química Física		
Centro	Facultad de Ciencias Química		
Despacho	C3501		
Horario de tutorías	A decidir en función de horarios		
URL Web			
E-mail	<a href="mailto:lgonsan@usal.es">lgonsan@usal.es</a>	Teléfono	923294485

Profesor	Iñaki Tuñón	Grupo / s	
Departamento	Departamento de Química Física		
Área			
Centro	Universidad de Valencia		
Despacho			
Horario de tutorías	Contactar por email		
URL Web	<a href="http://www.uv.es/tunon/">http://www.uv.es/tunon/</a>		
E-mail	<a href="mailto:Ignacio.tunon@uv.es">Ignacio.tunon@uv.es</a>	Teléfono	963544332

Profesor	Vicent Moliner	Grupo / s	
Departamento	Departamento de Química Física y Analítica		
Área			
Centro	Universitat Jaume I		
Despacho			
Horario de tutorías	Contactar por email		
URL Web	<a href="http://www.biocomp.uji.es">http://www.biocomp.uji.es</a>		
E-mail	moliner@uji.es	Teléfono	964728084

## 2.- Sentido de la materia en el plan de estudios

Bloque formativo al que pertenece la materia
Módulo 2: Métodos
Papel de la asignatura dentro del Bloque formativo y del Plan de Estudios.
Perfil profesional.

## 3.- Recomendaciones previas

--

## 4.- Objetivos de la asignatura

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:

- 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

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?

## 5.- Contenidos

- Mecánica Molecular: Fuerzas intermoleculares, Campos de Fuerza: estrategias de parametrización
- Métodos de simulación: Dinámica Molecular, Métodos MonteCarlo
- Dinámica Molecular Carr-Parrinello y Born-Oppenheimer
- QSAR: ecuaciones, validación. aplicaciones
- Métodos de solvente: modelos discretos, continuos, mixtos. Modelos híbridos QM/MM
- Cálculos de energía libre.

## 6.- Competencias a adquirir

<b>Específicas.</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>- El estudiante demuestra su conocimiento y comprensión de los hechos aplicando conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química Teórica y Modelización Computacional.</li> <li>- Comprender los fundamentos teóricos y prácticos de técnicas con las que puede analizar la estructura electrónica, morfo- lógica y estructural de un compuesto.</li> <li>- El estudiante está familiarizado con los postulados fundamentales de la Mecánica Cuántica necesarios para un buen entendimiento de los métodos más comunes utilizados en química cuántica.</li> <li>- El estudiante es capaz de discernir entre los diferentes métodos existentes y cómo seleccionar el más adecuado para cada problema.</li> </ul>
<b>Básicas/Generales.</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>- 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</li> <li>- 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</li> <li>- 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</li> <li>- 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</li> <li>- 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.</li> <li>- Los estudiantes deben ser 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.</li> </ul>
<b>Transversales.</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>- El estudiante es capaz de adaptarse a diferentes entornos culturales.</li> <li>- El estudiante es capaz de resolver problemas y tomar decisiones.</li> </ul>

## 7.- Metodologías docentes

**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 (<http://www.uam.es/moodle>). 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.

#### 8.- Previsión de distribución de las metodologías docentes

		Horas dirigidas por el profesor		Horas de trabajo autónomo	HORAS TOTALES
		Horas presenciales.	Horas no presenciales.		
Sesiones magistrales		20		40	65
Prácticas	- En aula				
	- En el laboratorio				
	- En aula de informática				
	- De campo				
	- De visualización (visu)				
Seminarios		15		20	30
Exposiciones y debates					
Tutorías					
Actividades de seguimiento online					
Preparación de trabajos				30	30
Otras actividades (detallar)					
Exámenes					
TOTAL		<b>35</b>		<b>90</b>	<b>125</b>

## 9.- Recursos

### Libros de consulta para el alumno

- 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

Otras referencias bibliográficas, electrónicas o cualquier otro tipo de recurso.

## 10.- Evaluación

### Consideraciones Generales

#### **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 se podrá realizar un examen cuyo peso en la nota final nunca superará el 40% del total.

**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.

**Criterios de evaluación**

--

**Instrumentos de evaluación**

--

**Recomendaciones para la evaluación.**

--

**Recomendaciones para la recuperación.**

--

**LINUX Y LINUX DE GESTIÓN****1.- Datos de la Asignatura**

Código	303154	Plan		ECTS	5.0
Carácter	Optativa	Curso	1	Periodicidad	
Área	Química Física				
Departamento	Química Física				
Plataforma Virtual	Plataforma:	Moodle			
	URL de Acceso:	<a href="http://moodle.usal.es">http://moodle.usal.es</a>			

**Datos del profesorado**

Profesor Coordinador	M <sup>a</sup> Dolores González Sánchez	Grupo / s	
Departamento	Química Física		
Área	Química Física		
Centro	Facultad de Ciencias Química		
Despacho	C3501		
Horario de tutorías	A decidir en función de horarios		
URL Web			
E-mail	lgonsan@usal.es	Teléfono	923294485

Profesor	Susana Gómez Carrasco	Grupo / s	
Departamento	Química Física		
Área	Química Física		
Centro	Facultad de Ciencias Química		
Despacho	C3505		
Horario de tutorías	A decidir en función de horarios		
URL Web			
E-mail	susana.gomez@usal.es	Teléfono	923294485

## 2.- Sentido de la materia en el plan de estudios

Bloque formativo al que pertenece la materia

Módulo 3: Optatividad

Papel de la asignatura dentro del Bloque formativo y del Plan de Estudios.

Perfil profesional.

## 3.- Recomendaciones previas

## 4.- Objetivos de la asignatura

El objetivo es conseguir un conocimiento no solo a nivel de usuario sino a nivel de administrador de sistema 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.

## 5.- Contenidos

Hardware.  
Sistemas operativos tipo UNIX/Linux.  
Diferentes variantes.  
Comandos fundamentales.  
Editor vi.  
Sistemas de archivos.  
Administración de sistemas.  
Programación en shell scripts.

## 6.- Competencias a adquirir

<p><b>Específicas.</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- El estudiante tiene conocimientos tanto a nivel de usuario como de administrador de sistema 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.</li> </ul>
<p><b>Básicas/Generales.</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- 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</li> <li>- 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</li> <li>- 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</li> <li>- 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</li> <li>- 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.</li> <li>- Los estudiantes deben ser 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.</li> </ul>
<p><b>Transversales.</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- El estudiante posee capacidad de análisis y síntesis.</li> <li>- El estudiante es organizado en el trabajo y sabe gestionar el tiempo.</li> </ul>

## 7.- Metodologías docentes

**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.

**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.

**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.

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

**8.- Previsión de distribución de las metodologías docentes**

		Horas dirigidas por el profesor		Horas de trabajo autónomo	HORAS TOTALES
		Horas presenciales.	Horas no presenciales.		
Sesiones magistrales		20		30	50
Prácticas	- En aula				
	- En el laboratorio	20		17	37
	- En aula de informática				
	- De campo				
	- De visualización (visu)				
Seminarios		10		8	18
Exposiciones y debates					
Tutorías					
Actividades de seguimiento online					
Preparación de trabajos				20	20
Otras actividades (detallar)					
Exámenes					
TOTAL		<b>50</b>		<b>75</b>	<b>125</b>

## 9.- Recursos

### Libros de consulta para el alumno

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.

### Otras referencias bibliográficas, electrónicas o cualquier otro tipo de recurso.

## 10.- Evaluación

### Consideraciones Generales

#### **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,

**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

Criterios de evaluación

Instrumentos de evaluación

Recomendaciones para la evaluación.

Recomendaciones para la recuperación.

**LABORATORIO DE QUÍMICA TEÓRICA APLICADA****1.- Datos de la Asignatura**

Código	303155	Plan		ECTS	5.0
Carácter	Optativa	Curso	1	Periodicidad	
Área	Química Física				
Departamento	Química Física				
Plataforma Virtual	Plataforma:	Moodle			
	URL de Acceso:	<a href="http://moodle.usal.es">http://moodle.usal.es</a>			

**Datos del profesorado**

Profesor Coordinador	M <sup>a</sup> Dolores González Sánchez	Grupo / s	
Departamento	Química Física		
Área	Química Física		
Centro	Facultad de Ciencias Química		
Despacho	C3501		
Horario de tutorías	A decidir en función de horarios		
URL Web			
E-mail	lgonsan@usal.es	Teléfono	923294485

Profesor	Jesús Aldegunde Carrión	Grupo / s	
Departamento	Química Física		
Área	Química Física		
Centro	Facultad de Ciencias Química		
Despacho	C3503		
Horario de tutorías	A decidir en función de horarios		
URL Web			
E-mail	jalde@usal.es	Teléfono	923294485

## 2.- Sentido de la materia en el plan de estudios

Bloque formativo al que pertenece la materia

Módulo 3: Optatividad

Papel de la asignatura dentro del Bloque formativo y del Plan de Estudios.

Perfil profesional.

## 3.- Recomendaciones previas

## 4.- Objetivos de la asignatura

## 5.- Contenidos

1. Introducción a la investigación científica: Búsquedas de bibliografía, presentación de trabajos científicos.
2. Herramientas informáticas: Acceso a centros de cálculo, herramientas de visualización en química, herramientas de representación gráfica, herramientas matemáticas.
3. Programas habituales de cálculo en Química Cuántica: Gaussian , Molcas, Molpro, etc..
4. Programas de cálculo de sistemas periódicos: VASP, CRYSTAL, etc.

## 6.- Competencias a adquirir

<b>Específicas.</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>- El estudiante tiene conocimientos tanto a nivel de usuario como de administrador de sistema 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.</li> </ul>
<b>Básicas/Generales.</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>- 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</li> <li>- 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</li> <li>- 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</li> <li>- 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</li> <li>- 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.</li> <li>- Los estudiantes deben ser 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.</li> </ul>
<b>Transversales.</b>
<p>El estudiante posee capacidad de análisis y síntesis.</p> <p>El estudiante es organizado en el trabajo y sabe gestionar el tiempo.</p>

## 7.- Metodologías docentes

**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.

**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.

**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.

**8.- Previsión de distribución de las metodologías docentes**

		Horas dirigidas por el profesor		Horas de trabajo autónomo	HORAS TOTALES
		Horas presenciales.	Horas no presenciales.		
Sesiones magistrales		20		30	50
Prácticas	- En aula				
	- En el laboratorio				
	- En aula de informática	20		15	35
	- De campo				
	- De visualización (visu)				
Seminarios					
Exposiciones y debates					
Tutorías					
Actividades de seguimiento online					
Preparación de trabajos		10		15	25
Otras actividades (detallar)					
Exámenes					
TOTAL		<b>50</b>		<b>60</b>	<b>110</b>

### 9.- Recursos

Libros de consulta para el alumno

Otras referencias bibliográficas, electrónicas o cualquier otro tipo de recurso.

### 10.- Evaluación

Consideraciones Generales

#### 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 informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura,
- 40 % la discusión que sobre la misma se realice con el profesor en tutorías y seminarios.

#### 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.
Criterios de evaluación
Instrumentos de evaluación
Recomendaciones para la evaluación.
Recomendaciones para la recuperación.

## LÁSERES

### 1.- Datos de la Asignatura

Código	303156	Plan		ECTS	5.0
Carácter	Optativa	Curso	1	Periodicidad	
Área	Química Física				
Departamento	Química Física				
Plataforma Virtual	Plataforma:	Moodle			
	URL de Acceso:	<a href="http://moodle.usal.es">http://moodle.usal.es</a>			

### Datos del profesorado

Profesor Coordinador	M <sup>a</sup> Dolores González Sánchez	Grupo / s	
Departamento	Química Física		
Área	Química Física		
Centro	Facultad de Ciencias Química		
Despacho	C3501		
Horario de tutorías	A decidir en función de horarios		
URL Web			
E-mail	<a href="mailto:lgonsan@usal.es">lgonsan@usal.es</a>	Teléfono	923294485

Profesor	Paula Riviere	Grupo / s	
Departamento	Departamento de Química		
Área			
Centro	Universidad Autónoma de Madrid		
Despacho	13- 302		
Horario de tutorías	Contactar por email		
URL Web	<a href="http://campusys.qui.uam.es/?page_id=123">http://campusys.qui.uam.es/?page_id=123</a>		
E-mail	<a href="mailto:paula.riviere@uam.es">paula.riviere@uam.es</a>	Teléfono	914973461

Profesor	Luca Argenti	Grupo / s	
Departamento	Departamento de Química		
Área			
Centro	Universidad Autónoma de Madrid		
Despacho	13- 308		
Horario de tutorías	Contactar por email		
URL Web	<a href="http://campusys.qui.uam.es/?page_id=115">http://campusys.qui.uam.es/?page_id=115</a>		
E-mail	luca.argenti@uam.es	Teléfono	914973461

## 2.- Sentido de la materia en el plan de estudios

Bloque formativo al que pertenece la materia
Módulo 3: Optatividad
Papel de la asignatura dentro del Bloque formativo y del Plan de Estudios.
Perfil profesional.

## 3.- Recomendaciones previas

--

## 4.- Objetivos de la asignatura

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.

## 5.- Contenidos

- 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. Segundo armónico. Pulsos láseres de atosegundos y trenes de pulsos de atosegundos.

**4. Interacción láser-materia.** Descripción clásica y cuántica. Procesos multifotónicos y efecto túnel. Modelo de los tres pasos. Generación de armónicos altos. Doble ionización. Moléculas: aproximación de Born-Oppenheimer. Explosión coulombiana.

**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. Moléculas: bond softening. Ionización aumentada.

**6. Tratamiento teórico.** Bases de estados en el continuo electrónico: Bsplines. Integración directa de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo. Métodos híbridos. Teoría del funcional de la densidad dependiente del tiempo (TDDFT).

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

**8. Control coherente de reacciones químicas.** Control del ratio entre ionización y disociación. Control óptimo.

## 6.- Competencias a adquirir

### Específicas.

- El estudiante demuestra su conocimiento y comprensión de los hechos aplicando conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química Teórica y Modelización Computacional.
- El estudiante tiene capacidad de generar nuevas ideas.
- El estudiante conoce los fundamentos de los láseres y está familiarizado con la resolución de problemas dependientes del tiempo y el tratamiento de estados del continuo.

### Básicas/Generales.

- 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
- 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
- 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
- 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
- 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.
- Los estudiantes deben ser 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.

## 7.- Metodologías docentes

**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 (<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.

**8.- Previsión de distribución de las metodologías docentes**

		Horas dirigidas por el profesor		Horas de trabajo autónomo	HORAS TOTALES
		Horas presenciales.	Horas no presenciales.		
Sesiones magistrales		34		51	85
Prácticas	- En aula				
	- En el laboratorio				
	- En aula de informática				
	- De campo				
	- De visualización (visu)				
Seminarios		10		8	18
Exposiciones y debates					
Tutorías		6		9	15
Actividades de seguimiento online					
Preparación de trabajos				7	7
Otras actividades (detallar)					
Exámenes					
TOTAL		<b>50</b>		<b>75</b>	<b>125</b>

## 9.- Recursos

### Libros de consulta para el alumno

- Introduction to Laser Technology. B. Hitz, J. J. Swing and J. Hecht. IEEE Press, New York, 2001.
- Introduction to Quantum Optics. G. Grynberg, A. Aspect and C. Fabre. Cambridge University Press. Cambridge, 2010.
- Principles of Lasers. O. Svelto. Plenum Press, New York. 1998.
- Laser Fundamentals. W. T. Silfvast. Cambridge University Press, Cambridge, 2004.
- Quantum Optics. M. O. Scully. Cambridge University Press. Cambridge, 1997.
- Lasers. A. E. Siegman. University Science Books. 1986.

### Otras referencias bibliográficas, electrónicas o cualquier otro tipo de recurso.

- Bachau H, Cormier E, Decleva P, Hansen J E and Martín F 2001 *Rep. Prog. Phys.* **64** 1815.
- Martín F 1999 *J. Phys. B (Topical Review)* **32** R197

## 10.- Evaluación

### Consideraciones Generales

#### **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.

**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.

Criterios de evaluación

Instrumentos de evaluación

Recomendaciones para la evaluación.

Recomendaciones para la recuperación.

**BIOQUÍMICA COMPUTACIONAL****1.- Datos de la Asignatura**

Código	303157	Plan		ECTS	5.0
Carácter	Optativa	Curso	1	Periodicidad	
Área	Química Física				
Departamento	Química Física				
Plataforma Virtual	Plataforma:	Moodle			
	URL de Acceso:	<a href="http://www.uam.es/moodle">http://www.uam.es/moodle</a>			

**Datos del profesorado**

Profesor Coordinador	M <sup>a</sup> Dolores González Sánchez	Grupo / s	
Departamento	Química Física		
Área	Química Física		
Centro	Facultad de Ciencias Química		
Despacho	C3501		
Horario de tutorías	A decidir en función de horarios		
URL Web			
E-mail	lgonsan@usal.es	Teléfono	923294485

Profesor	Victor Guallar	Grupo / s	
Departamento	Departamento de Química		
Área			
Centro	Centro de Supercomputación de Barcelona		
Despacho			
Horario de tutorías	Contactar por email		
URL Web	<a href="http://www.bsc.es/about-bsc/staff-directory/guallar-tasies-victor">http://www.bsc.es/about-bsc/staff-directory/guallar-tasies-victor</a>		
E-mail	victor.guallar@bsc.es	Teléfono	934137727

Profesor	Carles Curutchet Barat	Grupo / s	
Departamento	Departamento de Química Física		
Área			
Centro	Facultad de Ciencias – Universidad de Barcelona		
Despacho	PCiT-27		
Horario de tutorías	Contactar por email		
URL Web			
E-mail	carles.curuchet@udg.edu	Teléfono	972-189541

Profesor	Jaime Rubio Martínez	Grupo / s	
Departamento	Departamento de Química Física		
Área			
Centro	Facultad de Ciencias – Universidad de Barcelona		
Despacho			
Horario de tutorías	Contactar por email		
URL Web			
E-mail	jaime.rubio@ub.es	Teléfono	934039263

## 2.- Sentido de la materia en el plan de estudios

Bloque formativo al que pertenece la materia
Módulo 3: Optatividad
Papel de la asignatura dentro del Bloque formativo y del Plan de Estudios.
Perfil profesional.

## 3.- Recomendaciones previas

--

#### 4.- Objetivos de la asignatura

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.

#### 5.- Contenidos

- Estructura de moléculas biológicas; enlace y fuerzas intermoleculares.
- Programas de visualización molecular.
- Uso de programas de cálculo basados en métodos de estructura electrónica.
- Análisis de las superficies de energía potencial.
- Optimización de la geometría molecular.
- Modelización de sistemas químicos y bioquímicos en disolución.
- Modelización de biomoléculas: métodos de mecánica molecular.
- Modelización de reacciones enzimáticas: métodos híbridos de mecánica cuántica y mecánica molecular.
- Métodos estadísticos. Cálculos de parámetros cinéticos y termodinámicos de la reacción química.

#### 6.- Competencias a adquirir

<p><b>Específicas.</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- El estudiante demuestra su conocimiento y comprensión de los hechos aplicando conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química Teórica y Modelización Computacional.</li> </ul> <p>Ampliar y/o adquirir conocimiento de los métodos básicos de la Química Cuántica y evaluar críticamente su aplicabilidad.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Adquirir una visión global de las distintas aplicaciones de la Química Teórica y modelización en campos de la Química, Bio- química, Ciencias de Materiales, Astrofísica y Catálisis.</li> <li>- Conocer, manejar e interpretar las técnicas computacionales más comunes empleadas en la resolución de problemas químicos.</li> <li>- Manejar las principales fuentes de información científica, siendo capaces de buscar información relevante en internet, de las bases de datos bibliográficas y de la lectura crítica de trabajos científicos.</li> <li>- Presentar públicamente los resultados de una investigación, comunican las conclusiones a un tribunal especializado, per- sonas u organizaciones interesadas y debate con sus miembros aspectos relativos a los mismos.</li> <li>- Los estudiantes adquieren los conocimientos prácticos necesarios para llevar a cabo estudios en sistemas bioquímicos uti- lizando simulaciones computacionales.</li> </ul>
<p><b>Básicas/Generales.</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- 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</li> <li>- 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</li> <li>- 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 vincu- ladas a la aplicación de sus conocimientos y juicios</li> <li>- 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</li> <li>- 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.</li> <li>- Los estudiantes deben ser 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 oportu- nidades 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.</li> </ul>
<p><b>Transversales.</b></p> <p>El estudiante es capaz de adaptarse a diferentes entornos culturales.</p> <p>El estudiante es capaz de resolver problemas y tomar decisiones.</p> <p>El estudiante es organizado en el trabajo y sabe gestionar el tiempo.</p>

## 7.- Metodologías docentes

**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 (<http://www.uam.es/moodle>). 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 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.

**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.

**8.- Previsión de distribución de las metodologías docentes**

		Horas dirigidas por el profesor		Horas de trabajo autónomo	HORAS TOTALES
		Horas presenciales.	Horas no presenciales.		
Sesiones magistrales			20	30	50
Prácticas	- En aula				
	- En el laboratorio				
	- En aula de informática		20	15	35
	- De campo				
	- De visualización (visu)				
Seminarios					
Exposiciones y debates					
Tutorías			7	10	17
Actividades de seguimiento online					
Preparación de trabajos			8	12	20
Otras actividades (detallar)					
Exámenes		3			3
TOTAL		<b>3</b>	<b>55</b>	<b>67</b>	<b>125</b>

## 9.- Recursos

### Libros de consulta para el alumno

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

Otras referencias bibliográficas, electrónicas o cualquier otro tipo de recurso.

## 10.- Evaluación

Las pruebas de evaluación que se diseñen deben evaluar si se han adquirido las competencias descritas, por ello, es recomendable que al describir las pruebas se indiquen las competencias y resultados de aprendizaje que se evalúan.

### Consideraciones Generales

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,
- 30 % los controles periódicos.
- 60% la defensa de un caso práctico

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,
- 30 % los controles periódicos.
- 60% la defensa de un caso práctico

Criterios de evaluación

Instrumentos de evaluación

Recomendaciones para la evaluación.

Recomendaciones para la recuperación.

**DINÁMICA DE LAS REACCIONES QUÍMICAS****1.- Datos de la Asignatura**

Código	303148	Plan		ECTS	5.0
Carácter	Optativa	Curso	1	Periodicidad	
Área	Química Física				
Departamento	Química Física				
Plataforma Virtual	Plataforma:	Moodle			
	URL de Acceso:	<a href="http://www.uam.es/moodle">http://www.uam.es/moodle</a>			

**Datos del profesorado**

Profesor Coordinador	M <sup>a</sup> Dolores González Sánchez	Grupo / s	
Departamento	Química Física		
Área	Química Física		
Centro	Facultad de Ciencias Química		
Despacho	C3501		
Horario de tutorías	A decidir en función de horarios		
URL Web			
E-mail	lgonsan@usal.es	Teléfono	923294485

Profesor	Ramón Sayós	Grupo / s	
Departamento	Departamento de Química Física		
Área			
Centro	Facultad de Ciencias – Universidad de Barcelona		
Despacho			
Horario de tutorías	Contactar por email		
URL Web			
E-mail	r.sayos@ub.edu	Teléfono	

## 2.- Sentido de la materia en el plan de estudios

Bloque formativo al que pertenece la materia

Módulo 3: Optatividad

Papel de la asignatura dentro del Bloque formativo y del Plan de Estudios.

Perfil profesional.

## 3.- Recomendaciones previas

## 4.- Objetivos de la asignatura

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.

## 5.- Contenidos

- Definición y objeto de la Dinámica de Reacciones Químicas
- Tipos de colisiones. Análisis clásico.
- Scattering y potencial: caso elástico. Observables experimentales.
- Superficies de energía potencial. Colisiones inelásticas y reactivas.
- Método de las trayectorias cuasiclásicas
- El momento angular como herramienta para el estudio del mecanismo de las reacciones químicas.
- Teorías de velocidades de reacción
- Método de Monte Carlo cinético
- Métodos Multiescala en dinámica molecular: un punto de vista práctico
- Cálculos de constantes de velocidad de reacciones mediante dinámica cuántica
- Dinámica cuasiclásica de procesos gas-superficie
- Dinámica cuántica con paquetes de ondas: visión general y aplicaciones a las

reacciones químicas <ul style="list-style-type: none"> <li>○ Estudio teórico del mecanismo y la cinética de reacciones enzimáticas</li> </ul>
---

**6.- Competencias a adquirir**

<p><b>Específicas.</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- El estudiante demuestra su conocimiento y comprensión de los hechos aplicando conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química Teórica y Modelización Computacional.</li> <li>- Manejar las principales fuentes de información científica, siendo capaces de buscar información relevante en internet, de las bases de datos bibliográficas y de la lectura crítica de trabajos científicos.</li> <li>- Presentar públicamente los resultados de una investigación, comunican las conclusiones a un tribunal especializado, personas u organizaciones interesadas y debate con sus miembros aspectos relativos a los mismos.</li> <li>- El estudiante debe ser capaz de desenvolverse oralmente, en una lengua extranjera, en diferentes contextos de la vida cotidiana.</li> <li>- 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.</li> </ul>
<p><b>Básicas/Generales.</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- 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</li> <li>- 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</li> <li>- 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</li> <li>- 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.</li> <li>- Los estudiantes deben ser 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.</li> </ul>
<p><b>Transversales.</b></p> <p>El estudiante es capaz de adaptarse a diferentes entornos culturales.                  El estudiante posee capacidad de análisis y síntesis.                  Conocimiento de una lengua extranjera.                  El estudiante posee razonamiento crítico.</p>

**7.- Metodologías docentes**

<p><b>Lección Magistral:</b> El profesor expondrá los contenidos del curso en sesiones presenciales de dos horas basándose en los materiales docentes publicados en la plataforma Moodle.</p> <p><b>Docencia en red.</b> Se utilizará las distintas herramientas que ofrece la plataforma moodle (<a href="http://www.uam.es/moodle">http://www.uam.es/moodle</a>). Publicación de contenidos de la asignatura, herramientas de trabajo en grupo: foros de discusión y wiki, correo electrónico</p>
---

**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.

**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.

#### 8.- Previsión de distribución de las metodologías docentes

		Horas dirigidas por el profesor		Horas de trabajo autónomo	HORAS TOTALES
		Horas presenciales.	Horas no presenciales.		
Sesiones magistrales		20	15	53	88
Prácticas	- En aula				
	- En el laboratorio				
	- En aula de informática	4		3	7
	- De campo				
	- De visualización (visu)				
Seminarios					
Exposiciones y debates					
Tutorías					
Actividades de seguimiento online					
Preparación de trabajos		12		18	30
Otras actividades (detallar)					
Exámenes					
TOTAL		<b>36</b>	<b>15</b>	<b>74</b>	<b>125</b>

## 9.- Recursos

### Libros de consulta para el alumno

- 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.- “Dynamics of molecule surface interactions”, Gert D. Billing, John Wiley & Sons, 2000.
- 6.- “Dynamics of gas-surface interactions”, C.T. Rettner and M.N.R. Ashfold Ed.), Royal Society of Chemistry, 1991.
- 7.- “First-principles kinetic Monte Carlo simulations for heterogeneous catalysis: concepts, status and frontiers”, Karsten Reuter, in “Modeling heterogeneous catalytic reaction: from the molecular process to the technical system”, O. Deutschmann (Ed.), Wiley-VCH, 2011.

Otras referencias bibliográficas, electrónicas o cualquier otro tipo de recurso.

## 10.- Evaluación

Las pruebas de evaluación que se diseñen deben evaluar si se han adquirido las competencias descritas, por ello, es recomendable que al describir las pruebas se indiquen las competencias y resultados de aprendizaje que se evalúan.

Consideraciones Generales

<b>Criterios de evaluación</b>
<b>Convocatoria ordinaria</b> 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: <ul style="list-style-type: none"><li>○ 50 % Realización de los trabajos requeridos</li><li>○ 50 % Examen final</li><li>○</li></ul>
<b>Convocatoria extraordinaria</b>  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: <ul style="list-style-type: none"><li>○ 70 % Examen final,</li><li>○ 30 % Realización de los trabajos requeridos</li></ul>
<b>Instrumentos de evaluación</b>
<b>Recomendaciones para la evaluación.</b>
<b>Recomendaciones para la recuperación.</b>

## ESTADOS EXCITADOS

## 1.- Datos de la Asignatura

Código	303149	Plan		ECTS	5.0
Carácter	Optativa	Curso	1	Periodicidad	
Área	Química Física				
Departamento	Química Física				
Plataforma Virtual	Plataforma:	Moodle			
	URL de Acceso:	<a href="http://www.uam.es/moodle">http://www.uam.es/moodle</a>			

## Datos del profesorado

Profesor Coordinador	M <sup>a</sup> Dolores González Sánchez	Grupo / s	
Departamento	Química Física		
Área	Química Física		
Centro	Facultad de Ciencias Química		
Despacho	C3501		
Horario de tutorías	A decidir en función de horarios		
URL Web			
E-mail	lgonsan@usal.es	Teléfono	923294485

Profesor	Adolfo Bastida Pascual	Grupo / s	
Departamento	Departamento de Química Física		
Área			
Centro	Universidad de Murcia		
Despacho			
Horario de tutorías	Contactar por email		
URL Web	<a href="http://www.um.es/web/quimica-fisica/">http://www.um.es/web/quimica-fisica/</a>		
E-mail	bastida@um.es	Teléfono	934137727

Profesor	Inés Corral Pérez	Grupo / s	
Departamento	Departamento de Química		
Área			
Centro	Universidad Autónoma de Madrid		
Despacho	13 -307A		
Horario de tutorías	Contactar por email		
URL Web	<a href="http://web.uam.es/departamentos/ciencias/quimica/estruct/ines/index.html">http://web.uam.es/departamentos/ciencias/quimica/estruct/ines/index.html</a>		
E-mail	ines.corral@uam.es	Teléfono	91 497 8471

Profesor	Jesús González Vázquez	Grupo / s	
Departamento	Departamento de Química		
Área			
Centro	Universidad Autónoma de Madrid		
Despacho	13 -308		
Horario de tutorías	Contactar por email		
URL Web	<a href="http://campusys.qui.uam.es/?page_id=379">http://campusys.qui.uam.es/?page_id=379</a>		
E-mail	jesus.gonzalezv@uam.es	Teléfono	91 497 3008

## 2.- Sentido de la materia en el plan de estudios

Bloque formativo al que pertenece la materia
Módulo 3: Optatividad
Papel de la asignatura dentro del Bloque formativo y del Plan de Estudios.
Perfil profesional.

## 3.- Recomendaciones previas

--

#### 4.- Objetivos de la asignatura

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.

#### 5.- Contenidos

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
  - 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 y RASSCF. Selección del espacio activo. Cálculos *single state* vs. *state-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
  - Ejemplos.
6. Cálculos químico cuánticos de estados excitados: Métodos TD-DFT.
  - DFT, teoremas de Runge-Gross, TDDFT en el régimen de respuesta lineal, propagación de la densidad electrónica.

- Cálculo de espectros, aproximación de los funcionales xc.
  - Ejemplos.
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.

## 6.- Competencias a adquirir

### Específicas.

- Comprender los fundamentos teóricos y prácticos de técnicas con las que puede analizar la estructura electrónica, morfo- lógica y estructural de un compuesto.
- El estudiante debe ser capaz de desenvolverse oralmente, en una lengua extranjera, en diferentes contextos de la vida cotidiana.
- 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.

### Básicas/Generales.

- 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
- 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
- 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
- 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.

Los estudiantes deben ser 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.

El estudiante es capaz de adaptarse a diferentes entornos culturales.

Conocimiento de una lengua extranjera.

## 7.- Metodologías docentes

**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 (<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.

**8.- Previsión de distribución de las metodologías docentes**

		Horas dirigidas por el profesor		Horas de trabajo autónomo	HORAS TOTALES
		Horas presenciales.	Horas no presenciales.		
Sesiones magistrales		20	15	52	87
Prácticas	- En aula				
	- En el laboratorio				
	- En aula de informática				
	- De campo				
	- De visualización (visu)				
Seminarios					
Exposiciones y debates					
Tutorías					
Actividades de seguimiento online					
Preparación de trabajos		15		23	38
Otras actividades (detallar)					
Exámenes					
TOTAL		<b>35</b>	<b>15</b>	<b>75</b>	<b>125</b>

## 9.- Recursos

### Libros de consulta para el alumno

- 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 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).

Otras referencias bibliográficas, electrónicas o cualquier otro tipo de recurso.

## 10.- Evaluación

### Consideraciones Generales

#### **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:

1. 40 % Actividades desarrolladas durante el transcurso de las clases presenciales.
2. 60 % Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas y/o de ejercicios relacionados con la asignatura,

#### **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:

3. 70% el examen final,
4. 30 % la realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura.

Criterios de evaluación
Instrumentos de evaluación
Recomendaciones para la evaluación.
Recomendaciones para la recuperación.