



Asignatura: Laboratorio de Química Teórica Aplicada
Código: 32531
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

1. ASIGNATURA / **COURSE TITLE**

Laboratorio de Química Teórica Aplicada / [Applied Theoretical Chemistry Laboratory](#)

1.1. Código / **Course number**

32531

1.2. Materia / **Content area**

Módulo 3. Optatividad / [Module 3. Optional courses](#)

1.3. Tipo / **Course type**

Optativa / [Elective subject](#)

1.4. Nivel / **Course level**

Máster / [Master](#)

1.5. Curso / **Year**

1º / [1st](#)

1.6. Semestre / **Semester**

Anual / [Annual](#)

1.7. Número de créditos / **Credit allotment**

5 créditos ECTS / [5 ECTS credits](#)

1.8. Requisitos previos / **Prerequisites**

No hay requisitos previos / [There are no previous prerequisites](#)

1.9. Requisitos mínimos de asistencia a las sesiones presenciales / **Minimum attendance requirement**

La asistencia a las clases es obligatoria / [Attendance is mandatory](#)



Asignatura: Laboratorio de Química Teórica Aplicada
Código: 32531
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

1.10. Datos del equipo docente / Faculty data

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Ana Martín Sómer (Coordinadora/Coordinator)
Departamento de Química / **Department of Chemistry**
Facultad de Ciencias / **Faculty of Sciences**
Universidad Autónoma de Madrid
Despacho - Módulo / **Office - Module**: 502 - Módulo 13
Teléfono / **Phone**: 91 497 24 97
Correo electrónico/**Email**: ana.somer@uam.es
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: concertar cita por correo electrónico

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Cristina Díaz Blanco
Departamento de Química / **Department of Chemistry**
Facultad de Ciencias / **Faculty of Sciences**
Universidad Autónoma de Madrid
Despacho - Módulo / **Office - Module**: 305A
Teléfono / **Phone**: 91 497 5620
Correo electrónico/**Email**: cristina.diaz@uam.es
Página web/**Website**: <http://web.uam.es/departamentos/ciencias/quimica/cristina/>
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: concertar cita por correo electrónico

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Etienne Plesiat
Departamento de Química / **Department of Chemistry**
Facultad de Ciencias / **Faculty of Sciences**
Universidad Autónoma de Madrid
Correo electrónico/**Email**: etienne.plesiat@uam.es
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: concertar cita por correo electrónico

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Lara Martínez Fernández
Departamento de Química / **Department of Chemistry**
Facultad de Ciencias / **Faculty of Sciences**
Universidad Autónoma de Madrid
Correo electrónico/**Email**: lara.martfernandez@gmail.com
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: concertar cita por correo electrónico

1.11. Objetivos del curso / Course objectives

1.11a. Resultados del aprendizaje

1. Introducción a la investigación científica: Búsquedas de bibliografía y presentación de trabajos científicos.
2. Herramientas básicas informáticas: acceso a centros de cálculo, herramientas de visualización, herramientas de representación gráfica y herramientas de programación.
3. Toma de contacto con programas de cálculo dirigidos al estudio del estado fundamental y estados excitados.



Asignatura: Laboratorio de Química Teórica Aplicada
Código: 32531
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

4. Afianzar los conceptos de función de onda multiconfiguracional y correlación estática vs. correlación dinámica.
5. Toma de contacto con programas de cálculo dirigidos al estudio de dinámica.
6. Sistemas periódicos: Conceptos físicos básicos
7. Toma de contacto con programas de cálculo dirigidos al estudio de sistemas periódicos.
8. Localización y análisis de información relevante acerca de la función de onda y otras propiedades moleculares a partir de la salida de estos programas.
9. Familiarización con programas de visualización de resultados obtenidos con los programas de cálculo mencionados anteriormente.

1.11b. Competencias

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

BÁSICAS Y GENERALES

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

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

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

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

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

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



Asignatura: Laboratorio de Química Teórica Aplicada
Código: 32531
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

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

TRANSVERSALES

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

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

1.11a. Learning objectives

1. Introduction to scientific research: literature searches and presentation of scientific documents.
2. Basic informatic tools: visualization tools, graphing tools and math tools.
3. Introduction to quantum chemical packages aiming at the description of the ground and excited states.
4. Analysis of the information relevant to the wavefunction and other properties from the output of these programs.
5. Reinforce the concepts of static and dynamic correlation.
6. Get familiar with molecular orbital visualization programs
7. Periodic systems: basic physical concepts
8. Get familiar with periodic boundary conditions codes

1.11b. Skills

These learning objectives contribute to provide the following skills for the students:

BASIC AND GENERAL SKILLS

CB6 - Students possess and understand knowledge that provides a basis or opportunity to be original in the development and/or application of ideas, often in a research context.

CB7 - Students know how to apply the acquired knowledge and their problem solving capacity in new or little known environments within broader (or multidisciplinary) contexts related to their area of study.

CB8 - Students are able to integrate knowledge and face the complexity of making judgments from information that, incomplete or limited, includes reflections on social and ethical responsibilities linked to the application of their knowledge and judgments.



Asignatura: Laboratorio de Química Teórica Aplicada
Código: 32531
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

CB9 - Students know how to communicate their conclusions and the knowledge and reasons that support them to specialized and non-specialized audiences in a clear and unambiguous way.

CB10 - Students possess the learning skills that allow them to continue studying in way that will be self-directed or autonomous.

CG01 - Students are able to foster, in academic and professional contexts, technological and scientific progress within a society based on knowledge and respect for: a) fundamental rights and equal opportunities between men and women, b) The principles of equal opportunities and universal accessibility for persons with disabilities, and c) the values of a culture of peace and democratic values.

CG02 - Students are able to solve problems and make decisions of any kind under the commitment to the defense and practice of equality policies.

CROSS-COMPREHENSIVE SKILLS

CT02 - Students are organized at work demonstrating that they know how to manage their time and resources.

CT03 - Students have the ability of analyze and synthesize in such a way that they can understand, interpret and evaluate the relevant information by assuming with responsibility their own learning or, in the future, the identification of professional exits and employment fields

1.12. Contenidos del programa / Course contents

1. Herramientas básicas para el trabajo científico: programas para realizar gráficos (xmgrace), gestores de referencias (Mendeley, BibTeX), preparación de documentos con LaTeX(texto, ecuaciones, figuras, tablas y bibliografía).
 2. Breve introducción a la programación en Python.
 3. Programas habituales de cálculo en Química Cuántica: Gaussian, Mopac, y Molcas
 4. Programas de simulación dinámica: Venus
 5. Programas de cálculo de sistemas periódicos: VASP
 6. Programas de visualización de resultados: GView, Molden
-
1. Basic tools for scientific work: : plotting tools (xmgrace), reference managers (Mendeley, BibTeX), document preparation with LaTeX (text, equations, figures, tables and bibliography) .
 2. Brief introduction to Python programing.
 3. Introduction to conventional quantum chemistry programs: Gaussian, Mopac and Molcas
 4. Programs for dynamics simulations: Venus
 5. Periodic boundary conditions codes: VASP
 6. Programs for result visualization: Gview, Molden.



Asignatura: Laboratorio de Química Teórica Aplicada
Código: 32531
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

1.13. Referencias de consulta / **Course bibliography**

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

2. Métodos docentes / **Teaching methodology**

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

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

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

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

Lecture: The Professor will deliver face-to-face, or, online video lectures about the theoretical contents of the course during two-hour sessions. The presentations will be based on the different materials available at the Moodle platform.

Teaching in computer room. Teaching will be conducted in a computer room. The classes, in sessions from two to four hours, will include a brief theoretical introduction, in which the teacher will present the basic concepts, followed by practical applications, in which the student will learn through the resolution of practical examples.



Asignatura: Laboratorio de Química Teórica Aplicada
 Código: 32531
 Centro: Facultad de Ciencias
 Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
 Nivel: Máster
 Tipo: Formación Optativa
 N° de créditos: 5 ECTS

Network teaching: All the tools available at the Moodle website (<https://posgrado.uam.es>) will be used (uploading of teaching materials, utilization of work team strategies, wiki, blogs, e-mail, etc.).

Tutoring sessions: The professor can organize either individual or group tutoring sessions about particular topics and questions raised by students.

3. Tiempo de trabajo del estudiante / Student workload

Presencial:

Clases prácticas en aula virtual40 horas
 Tutorías.....10 horas

No Presencial:

Estudio autónomo individual o en grupo.....45 horas
 Elaboración de una memoria con resultados obtenidos en las prácticas30 horas

TOTAL (5 ECTS * 25 horas/ECTS).....125 horas

Contact hours:

Practical lessons in virtual classroom40 hours
 Tutoring.....10 hours

Independent study hours:

self-study or group study45 hours
 Elaboration of a memory based on the practical results.....30 hours

TOTAL (5 ECTS * 25 hours/ECTS).....125 hours

4. Métodos de evaluación y porcentaje en la calificación final / Evaluation procedures and weight of components in the final grade

Convocatoria ordinaria

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

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



Asignatura: Laboratorio de Química Teórica Aplicada
Código: 32531
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

- 60% Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura. De este porcentaje, el 40% corresponde con la realización del informe crítico y el 20% con las actividades a evaluar en el aula.
- 40% Discusión en tutorías y/o seminarios sobre los ejercicios, trabajos o prácticas realizadas en la asignatura, que podrá ser en forma de exposición oral del informe realizado.

Convocatoria extraordinaria

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

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

Ordinary assessment

The knowledge acquired by the student will be evaluated along the course. The educational model to follow will emphasize a continuous effort and advance in training and learning.

The final student mark will be based on evaluation of a research project (proposed and supervised during in-person lessons) covering the knowledge acquired throughout the course. Class participation will also be evaluated. The next criteria will be followed for evaluation:

- 60% A report of the practices or exercises related to the subject. Of this percentage, 40% corresponds to the completion of the report and 20% classroom activities.
- 40% Discussion about the exercises, works of practices carried out in the subject, which may be in the form of an oral presentation of the report made.

Extraordinary assessment

The student will have to face a final exam, including both theory and practical exercises. The student mark will be obtained from:

- 60% from the student report,
- 40% from classroom activities



Asignatura: Laboratorio de Química Teórica Aplicada
 Código: 32531
 Centro: Facultad de Ciencias
 Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
 Nivel: Máster
 Tipo: Formación Optativa
 N° de créditos: 5 ECTS

5. Cronograma* / **Course calendar**

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

Por favor, comprobar el horario oficial publicado en la página web del Máster.
 Please, check the official schedule posted on the master website.

*Este cronograma tiene carácter orientativo

*This course calendar is orientative



Asignatura: Bioquímica Computacional
Código: 32533
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

1. ASIGNATURA / **COURSE TITLE**

Bioquímica Computacional / [Computational Biochemistry](#)

1.1. Código / **Course number**

32533

1.2. Materia / **Content area**

Módulo 3. Optatividad / [Module 3. Optional courses](#)

1.3. Tipo / **Course type**

Optativa / [Elective subject](#)

1.4. Nivel / **Course level**

Máster / [Master](#)

1.5. Curso / **Year**

1º / [1st](#)

1.6. Semestre / **Semester**

Anual / [Annual](#)

1.7. Número de créditos / **Credit allotment**

5 créditos ECTS / [5 ECTS credits](#)

1.8. Requisitos previos / **Prerequisites**

No hay requisitos previos / [There are no previous prerequisites](#)

1.9. Requisitos mínimos de asistencia a las sesiones presenciales / **Minimum attendance requirement**

La asistencia a las clases es obligatoria / [Attendance is mandatory](#)



Asignatura: Bioquímica Computacional
Código: 32533
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

1.10. Datos del equipo docente / Faculty data

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Jaime Rubio Martinez (Coordinador/**Coordinator**)
Departamento de Química Física / **Department of Physical Chemistry**
Facultad de Ciencias / **Faculty of Sciences**
Universidad de Barcelona / **University of Barcelona**
Despacho - Módulo / **Office - Module**:
Teléfono / **Phone**: 934039263
Correo electrónico/**Email**: jaime.rubio@ub.edu
Página web/**Website**: <http://www.ub.edu/cadrugdesign/people/jaime/jaime.html>
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: contact by email

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Victor Guallar
Departamento de Química / **Department of Chemistry**
Centro de Supercomputación de Barcelona/ **Barcelona Supercomputing Center**
Despacho - Módulo / **Office - Module**:
Teléfono / **Phone**: 934137727
Correo electrónico/**Email**: victor.guallar@bsc.es
Página web/**Website**: <http://www.bsc.es/about-bsc/staff-directory/guallar-tasies-victor>
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: contact by email

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Carles Eduard Curutchet Barat
Departamento de Farmacia y Tecnología Farmacéutica y Físicoquímica / **Department of Pharmacy and Pharmaceutical Technology and Physical Chemistry**
Facultad de Farmacia y Ciencias de la Alimentación / **Faculty of Pharmacy and Food Sciences**
Universidad de Barcelona/ **University of Barcelona**
Despacho - Módulo / **Office - Module**:
Teléfono / **Phone**: 934024557
Correo electrónico/**Email**: carles.curutchet@ub.edu
Página web/**Website**: <http://carlescurutchet.wordpress.com>
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: contact by email

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Rodrigo Casasnovas Perera
Departamento de Química / **Department of Chemistry**
Facultad de Ciencias / **Faculty of Sciences**
Universidad de las Islas Baleares / **University of the Balearic Islands**
Despacho - Módulo / **Office - Module**:
Teléfono / **Phone**: 971173491
Correo electrónico/**Email**: rodrigo.casasnovas@uib.es
Página web/**Website**:
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: contact by email



Asignatura: Bioquímica Computacional
Código: 32533
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

1.11. Objetivos del curso / Course objectives

1.11a. Resultados del aprendizaje

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

1.11b. Competencias

Estos resultados del aprendizaje contribuyen a la adquisición de las siguientes competencias para el estudiante:

BÁSICAS Y GENERALES

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

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

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

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

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

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



Asignatura: Bioquímica Computacional
Código: 32533
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

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

TRANSVERSALES

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

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

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

ESPECÍFICAS

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

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

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

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

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

1.11a. Learning objectives

To know the main structural features of biological molecules and the interactions that are at their origin. To understand the theoretical basis of the most used techniques for the simulation of biomolecules. To be able to apply these techniques to simple problems. To recognize the limitations of the studied techniques and to choose among them the most suitable for a given problem.



Asignatura: Bioquímica Computacional
Código: 32533
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

1.11b. Skills

These learning objectives contribute to provide the following skills for the students:

BASIC AND GENERAL SKILLS

CB6 - Students possess and understand knowledge that provides a basis or opportunity to be original in the development and/or application of ideas, often in a research context.

CB7 - Students know how to apply the acquired knowledge and their problem solving capacity in new or little known environments within broader (or multidisciplinary) contexts related to their area of study.

CB8 - Students are able to integrate knowledge and face the complexity of making judgments from information that, incomplete or limited, includes reflections on social and ethical responsibilities linked to the application of their knowledge and judgments.

CB9 - Students know how to communicate their conclusions and the knowledge and reasons that support them to specialized and non-specialized audiences in a clear and unambiguous way.

CB10 - Students possess the learning skills that allow them to continue studying in a way that will be self-directed or autonomous.

CG01 - Students are able to foster, in academic and professional contexts, technological and scientific progress within a society based on knowledge and respect for: a) fundamental rights and equal opportunities between men and women, b) The principles of equal opportunities and universal accessibility for persons with disabilities, and c) the values of a culture of peace and democratic values.

CG02 - Students are able to solve problems and make decisions of any kind under the commitment to the defense and practice of equality policies.

CROSS-COMPREHENSIVE SKILLS

CT01 - Students are able to adapt their selves to different cultural environments by demonstrating that they are able to respond to change with flexibility.

CT02 - Students are organized at work demonstrating that they know how to manage their time and resources.

CT03 - Students have the ability of analyze and synthesize in such a way that they can understand, interpret and evaluate the relevant information by assuming with responsibility their own learning or, in the future, the identification of professional exits and employment fields.



Asignatura: Bioquímica Computacional
Código: 32533
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

SPECIFIC SKILLS

CE01- Students demonstrate their knowledge and understanding of the facts applying concepts, principles and theories related to the Theoretical Chemistry and Computational Modeling.

CE03 - Students acquire an overview of the different applications of the Theoretical Chemistry and modeling in the fields of Chemistry, Biochemistry, Materials Sciences, Astrophysics and Catalysis.

CE04 - Students understand the theoretical and practical bases of computational techniques with which they can analyze the electronic, morphological and structural structure of a compound and interpret the results adequately.

CE05 - Students have the ability to handle the main sources of scientific information related to Theoretical Chemistry and Computational Modeling. They are able to search for relevant information in web pages of structural data, physical chemical experimental data, databases of molecular calculations, databases of scientific bibliography and scientific works.

CE25 - Students acquire the practical knowledge necessary to carry out studies in biochemical systems using computer simulations.

1.12. Contenidos del programa / Course contents

1. Introducción. Biomoléculas y sus propiedades. Bases de datos estructurales de biomoléculas. Relación estructura-energía: Modelización de biomoléculas.
2. Superficies de energía potencial en biomoléculas. Mecánica Molecular. Campos de fuerzas de Mecánica Molecular. Exploración conformacional. Minimización: Coordenada de reacción. Métodos de Dinámica Molecular y Monte Carlo. Métodos de predicción de estructura.
3. Métodos avanzados de Dinámica Molecular. Dinámica Molecular ab-initio Born-Oppenheimer y métodos híbridos QM/MM. Técnicas de mejora del muestreo conformacional, cálculos de energía libre y Metadinámica. .
4. Modelos mixtos QM/MM. Inmersión electrostática y polarizable. Modelos continuos de solvatación. Extensión a estados excitados. .
5. Relaciones estructura-actividad. Descriptores moleculares. Relaciones cuantitativas estructura-actividad (QSAR).
6. Interacciones proteína-ligando. Técnicas de docking..



Asignatura: Bioquímica Computacional
Código: 32533
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

1. Introduction. Biomolecules and their properties. Structural databases of biomolecules. Structure-energy relationship: Biomolecules modeling.
2. Potential energy surfaces in biomolecules. Molecular mechanics force fields. Conformational exploration. Minimization: Reaction coordinate. Molecular Dynamics and Monte Carlo methods. Structure prediction methods. .
3. Advanced MD methods. Ab initio Born-Oppenheimer MD, hybrid QM/MM MD simulations. Enhanced sampling techniques, free energy simulations and Metadynamics .
4. Mixed QM/MM models. Electrostatic and polarizable embedding. Continuum solvation models. Extension to excited states .
5. Structure-activity relationships. Molecular descriptors. Quantitative structure-activity relationships (QSAR).
6. Protein-ligand interaction. Docking techniques..

1.13. Referencias de consulta / Course bibliography

Molecular Modeling and Simulation: An Interdisciplinary Guide
Tamar Schlick
Springer

Understanding Molecular Simulation, Second Edition: From Algorithms to Applications
Daan Frenkel
Academic Press

Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models
Chris Cramer
Wiley

2. Métodos docentes / Teaching methodology

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

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



Asignatura: Bioquímica Computacional
 Código: 32533
 Centro: Facultad de Ciencias
 Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
 Nivel: Máster
 Tipo: Formación Optativa
 N° de créditos: 5 ECTS

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

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

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

Lecture: The Professor will deliver lectures about the theoretical contents of the course during two-hour sessions. The presentations will be based on the different materials available at the Moodle platform.

Network teaching: All the tools available at the Moodle website (<https://posgrado.uam.es>) will be used (uploading of teaching materials, utilization of work team strategies, wiki, blogs, e-mail, etc.).

Teaching in computer room. Teaching will be conducted in a computer room. The classes, in sessions of three hours, will include a brief theoretical introduction, in which the teacher will present the basic concepts, followed by practical applications, in which the student will learn through the resolution of practical examples.

Tutoring sessions: The professor can organize either individual or group tutoring sessions about particular topics and questions raised by students.

Written reports: Orientation and supervision in the preparation of written reports.

3. Tiempo de trabajo del estudiante / Student workload

Presencial:

Clases teóricas en aula / aula virtual20 horas

Tutorías.....10 horas

Clases prácticas en aula virtual20 horas

No Presencial:

Elaboración de una memoria con resultados experimentales obtenidos en las prácticas.....16 horas

Estudio autónomo individual o en grupo.....59 horas

TOTAL (5 ECTS * 25 horas/ECTS).....125 horas



Asignatura: Bioquímica Computacional
 Código: 32533
 Centro: Facultad de Ciencias
 Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
 Nivel: Máster
 Tipo: Formación Optativa
 N° de créditos: 5 ECTS

Contact hours:

Theoretical lessons in classroom / virtual classroom20 hours

Tutoring.....10 hours

Practical lessons in virtual classroom20 hours

Independent study hours:

Elaboration of a memory based on the practical results.....16 hours

self-study or group study59 hours

TOTAL (5 ECTS * 25 hours/ECTS).....125 hours

4. Métodos de evaluación y porcentaje en la calificación final / Evaluation procedures and weight of components in the final grade

Convocatoria ordinaria

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

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

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

Convocatoria extraordinaria

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

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

Ordinary assessment

The knowledge acquired by the student will be evaluated along the course. The educational model to follow will emphasize a continuous effort and advance in training and learning.



Asignatura: Bioquímica Computacional
Código: 32533
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

The final student mark will be based on exercises that must be done during the course. The next criteria will be followed for assessment of student exercises:

- 10% attendance and participation in class,
- 90% practical case study. Part of this percentage may be applied to the performance of tests.

Extraordinary assessment

The student will have to face a final exam, including both theory and practical exercises. The student mark will be obtained from:

- 60% theoretical exam,
- 40% practical exam.

5. Cronograma* / Course calendar

Por favor, comprobar el horario oficial publicado en la página web del Máster.
Please, check the official schedule posted on the master website.

*Este cronograma tiene carácter orientativo

*This course calendar is orientative



Asignatura: Técnicas Computacionales y Cálculo Numérico
Código: 32526
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

1. ASIGNATURA / COURSE TITLE

Técnicas Computacionales y Cálculo Numérico / [Computational Techniques and Numerical Calculations](#)

1.1. Código / Course number

32526

1.2. Materia / Content area

Módulo 2. Métodos / [Module 2. Methods](#)

1.3. Tipo / Course type

Obligatoria / [Compulsory subject](#)

1.4. Nivel / Course level

Máster / [Master](#)

1.5. Curso / Year

1º / [1st](#)

1.6. Semestre / Semester

Anual / [Annual](#)

1.7. Número de créditos / Credit allotment

5 créditos ECTS / [5 ECTS credits](#)

1.8. Requisitos previos / Prerequisites

No hay requisitos previos / [There are no previous prerequisites](#)

1.9. Requisitos mínimos de asistencia a las sesiones presenciales / Minimum attendance requirement

La asistencia a las clases es obligatoria / [Attendance is mandatory](#)



Asignatura: Técnicas Computacionales y Cálculo Numérico
Código: 32526
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

1.10. Datos del equipo docente / Faculty data

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Jon Mujika (Coordinador / **Coordinator**)
Facultad de Química / **Faculty of Chemistry**
Universidad del País Vasco/ **University of the Basque Country**
Teléfono / **Phone**: +34 943015341
Correo electrónico/**Email**: joni.mujika@ehu.eus
Páginaweb/**Website**:http://www.ehu.eus/chemistry/theory/1_group/dr-joni-mujika/
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: contact by email

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Cristina Sanz
Departamento de Química Física Aplicada / **Department of Applied Chemistry Physics**
Facultad de Ciencias / **Faculty of Sciences**
Universidad Autónoma de Madrid
Despacho - Módulo / **Office - Module**: 504
Teléfono / **Phone**: 91 497 3922
Correo electrónico/**Email**: cristina.sanz@uam.es
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: contactar previamente por e-mail/
contact by email

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Alicia Palacios Cañas
Departamento de Química / **Department of Chemistry**
Facultad de Ciencias / **Faculty of Sciences**
Universidad Autónoma de Madrid
Despacho - Módulo / **Office - Module**: 307B
Teléfono / **Phone**: 91 497 3019
Correo electrónico/**Email**: alicia.palacios@uam.es
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: L-V, 09:00-18:00 (contactar
previamente por e-mail) (**contact by email**)

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Pere Alemany i Cahner
Departamento de Química Física/ **Department of Physical Chemistry**
Universidad de Barcelona / **University of Barcelona**
Correo electrónico/**Email**: p.alemany@ub.edu
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: Contact by email

1.11. Objetivos del curso / Course objectives

1.11a. Resultados del aprendizaje

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



Asignatura: Técnicas Computacionales y Cálculo Numérico
Código: 32526
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

1.11b. Competencias

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

BÁSICAS Y GENERALES

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

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

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

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

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

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

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

TRANSVERSALES

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

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



Asignatura: Técnicas Computacionales y Cálculo Numérico
Código: 32526
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

ESPECÍFICAS

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

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

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

1.11a. Learning objectives

To introduce the most usual programming techniques in physics and chemistry. The student will learn the essential computational tools and will learn to create efficient programs using the FORTRAN programming language.

1.11b. Skills

These learning objectives contribute to provide the following skills for the students:

BASIC AND GENERAL SKILLS

CB6 - Students possess and understand knowledge that provides a basis or opportunity to be original in the development and/or application of ideas, often in a research context.

CB7 - Students know how to apply the acquired knowledge and their problem solving capacity in new or little known environments within broader (or multidisciplinary) contexts related to their area of study.

CB8 - Students are able to integrate knowledge and face the complexity of making judgments from information that, incomplete or limited, includes reflections on social and ethical responsibilities linked to the application of their knowledge and judgments.

CB9 - Students know how to communicate their conclusions and the knowledge and reasons that support them to specialized and non-specialized audiences in a clear and unambiguous way.

CB10 - Students possess the learning skills that allow them to continue studying in a way that will be self-directed or autonomous.

CG01 - Students are able to foster, in academic and professional contexts, technological and scientific progress within a society based on knowledge and respect for: a) fundamental rights and equal opportunities between men and women,



Asignatura: Técnicas Computacionales y Cálculo Numérico
Código: 32526
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

b) The principles of equal opportunities and universal accessibility for persons with disabilities, and c) the values of a culture of peace and democratic values.

CG02 - Students are able to solve problems and make decisions of any kind under the commitment to the defense and practice of equality policies.

CROSS-COMPREHENSIVE SKILLS

CT01 - Students are able to adapt their selves to different cultural environments by demonstrating that they are able to respond to change with flexibility.

CT03 - Students have the ability of analyze and synthesize in such a way that they can understand, interpret and evaluate the relevant information by assuming with responsibility their own learning or, in the future, the identification of professional exits and employment fields.

SPECIFIC SKILLS

CE04 - Students understand the theoretical and practical bases of computational techniques with which they can analyze the electronic, morphological and structural structure of a compound and interpret the results adequately.

CE13 - Students handle the most common programming techniques in physics and chemistry and are familiar with the essential computational tools in these areas.

CE14 - Students are able to develop efficient programs in FORTRAN in order to use such tools in their daily work.

1.12. Contenidos del programa / Course contents

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

Programming and Algorithms.
Fortran programming.
Matrix calculations.
Integrals.
Function optimization.
Multivariate analysis.



Asignatura: Técnicas Computacionales y Cálculo Numérico
Código: 32526
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

1.13. Referencias de consulta / Course bibliography

Química Teórica y Computacional. J.Andrés y J.Bertrán, Eds. Publ Univ.Jaime I (Castellón) 2000

Ingeniería del software: Diseño estructurado. J.A. Calco Manzasno y L.Fernández Sanz. Univ. Politécnica de Madrid (Madrid) 1995

Structured FORTRAN-77 for Engineers and Scientists, D.M. Etter. Addison Wesley Longman (Menlo Park) 1977

S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling and B. P. Flannery, Numerical Recipes in Fortran (second edition, Univ. Press, Cambridge, 2003)

A. R. Krommer and C. W. Ueberhuber, Numerical integration on Advance Computer Systems (Springer-Verlag Berlín, Heidelberg, 1994)

P. J. Davis and P. Rabinowitz, Methods of Numerical Integration (second edition, Academic Press, Inc., London, 1984)

C. A. Floudas and P. M. Pardalos, Optimization in Computational Chemistry and Molecular Biology - Local and Global Approaches (Springer, 1st edition, 2000)

2. Métodos docentes / Teaching methodology

Clases en aula de informática. El profesor expondrá los contenidos del curso en sesiones presenciales o por video conferencia de dos horas. La docencia se impartirá en un aula de informática. Las clases, en sesiones de dos horas, incluirán una introducción teórica breve, en la que el profesor expondrá los conceptos básicos, y aplicaciones prácticas, y una parte práctica, en la que el estudiante aprenderá a través de la resolución de casos prácticos. Durante las sesiones en el aula de informática el estudiante tendrá que realizar distintos programas.

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

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

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



Asignatura: Técnicas Computacionales y Cálculo Numérico
 Código: 32526
 Centro: Facultad de Ciencias
 Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
 Nivel: Máster
 Tipo: Formación Obligatoria
 N° de créditos: 5 ECTS

Lecture classes in the computing lab: The Professor will deliver face-to-face, or, online video lectures about the theoretical contents of the course during two-hour sessions. Teaching will be done in a computer lab, Two hours lectures will include an introduction, a theory to introduce the basic concepts and practical work. Student will learn through practicing. During the practical sessions the student will develop his own programs

Online Seminars: After the lecturing period, online seminars between the Professor and the students will be arranged at the *virtual classroom* in order to discuss the results being obtained, the potential problems and difficulties in using the various methodologies as well as to supervise the preparation of the required reports.

Tutoring sessions: The professor can organize either individual or group tutoring sessions about particular topics and questions raised by students.

Network teaching: All the tools available at the Moodle website (<https://posgrado.uam.es>) will be used (uploading of teaching materials, utilization of work team strategies, wiki, blogs, e-mail, etc.).

3. Tiempo de trabajo del estudiante / Student workload

Presencial:

Clases teórico/prácticas en aula de informática.....20 horas
 Tutorías.....8 horas
 Seminarios.....7 horas

No Presencial:

Estudio autónomo individual o en grupo.....40 horas
 Preparación de seminarios.....20 horas
 Elaboración de una memoria con ejercicios planteados en clase.....30 horas

TOTAL (5 ECTS * 25 horas/ECTS).....125 horas

Contact hours:

Theoretical lessons in classroom / virtual classroom20 hours
 Tutoring.....8 hours
 Seminar.....7 hours

Independent study hours:

self-study or group study40 hours
 Preparation of seminars, assigned tasks and study.....20 hours
 Elaboration of a memory based on the exercises proposed in class.....30 hours

TOTAL (5 ECTS * 25 hours/ECTS).....125 hours



Asignatura: Técnicas Computacionales y Cálculo Numérico
Código: 32526
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

4. Métodos de evaluación y porcentaje en la calificación final / Evaluation procedures and weight of components in the final grade

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 % Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura.

Ordinary assessment

The knowledge acquired by the student will be evaluated along the course. The educational model to follow will emphasize a continuous effort and advance in training and learning.

The final student mark will be based on exercises that must be done during the course. The next criteria will be followed for assessment of student exercises:

- 60% from the student report,
- 40% from discussions between the student and professor in tutoring sessions and seminars.

Extraordinary assessment

The student will have to face a final exam, including both theory and practical exercises. The student mark will be obtained from:

- 70% from the final exam,
- 30% from the individual work.

Curso 2018-2019



Asignatura: Técnicas Computacionales y Cálculo Numérico
Código: 32526
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

5. Cronograma* / **Course calendar**

Por favor, comprobar el horario oficial publicado en la página web del Máster.
[Please, check the official schedule posted on the master website.](#)

*Este cronograma tiene carácter orientativo

[*This course calendar is orientative](#)



Asignatura: Profundización en los Métodos de la Química Teórica
Código: 32529
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

1. ASIGNATURA / **COURSE TITLE**

Profundización en los Métodos de la Química Teórica / [Deepening in Methods of Theoretical Chemistry](#)

1.1. Código / **Course number**

32529

1.2. Materia / **Content area**

Módulo 3. Optatividad / [Module 3. Optional courses](#)

1.3. Tipo / **Course type**

Optativa / [Elective subject](#)

1.4. Nivel / **Course level**

Máster / [Master](#)

1.5. Curso / **Year**

1º / [1st](#)

1.6. Semestre / **Semester**

2º / [2nd](#)

1.7. Número de créditos / **Credit allotment**

5 créditos ECTS / [5 ECTS credits](#)

1.8. Requisitos previos / **Prerequisites**

No hay requisitos previos / [There are no previous prerequisites](#)

1.9. Requisitos mínimos de asistencia a las sesiones presenciales / **Minimum attendance requirement**

La asistencia a las clases es obligatoria / [Attendance is mandatory](#)



Asignatura: Profundización en los Métodos de la Química Teórica
Código: 32529
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

1.10. Datos del equipo docente / Faculty data

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Marcos Mandado Alonso (coordinador)
Departamento de Química Física / **Department of Physical Chemistry**
Universidad de Vigo/ **Vigo University**
Teléfono / **Phone**: +34 986813812
Despacho - Módulo / **Office - Module**:
Correo electrónico/**Email**: mandado@uvigo.es
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: contact by email

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Paula Mori
Departamento de Química / **Department of Chemistry**
Universidad Autónoma de Madrid / **University Autonoma de Madrid**
Facultad de Ciencias / **Faculty of Sciences**
Despacho 504 Módulo 13 / **Office 504 Module13**
Teléfono / **Phone**: +34 914974961
Correo electrónico/**Email**: paula.mori@uam.es
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: contact by email

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Ramón López Rodríguez
Departamento de Química Física / **Department of Physical Chemistry**
Universidad de Oviedo/ **Oviedo University**
Despacho - Módulo / **Office - Module**: 152
Correo electrónico/**Email**: rlopez@uniovi.es
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: contact by email

1.11. Objetivos del curso / Course objectives

1.11a. Resultados del aprendizaje

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

- Conocimiento de la problemática específica de los métodos mecanocuánticos aplicados a sistemas de gran tamaño.
- comprensión y capacidad de discriminación entre distintos métodos analíticos útiles para resolver integrales moleculares monoeléctricas y bielectricas según la naturaleza de dichas integrales.
- Comprensión de las características esenciales de los métodos numéricos utilizados para resolver integrales moleculares. Como consecuencia, capacidad para modificar parámetros propios de cada método para resolver problemas prácticos y para escoger el método más adecuado a un problema concreto.
- Conocimiento detallado de algunos métodos que aceleran el proceso de resolución de ecuaciones autoconsistentes.



Asignatura: Profundización en los Métodos de la Química Teórica
Código: 32529
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

- Conocimiento de los fundamentos de los métodos locales para evaluar la energía de correlación.
- Conocimiento detallado de las bases metodológicas de los métodos más comunes.
- Capacidad para estimar coste computacional y escalado
- Estimación de la magnitud de los errores asociados
- Capacidad para determinar su posibilidad de aplicación a un problema concreto.
- Teoría del funcional de la densidad: matemática avanzada, funcionales y conceptos recientes.
- Retos y perspectivas de la teoría del funcional de la densidad.

1.11b. Competencias

Estos resultados del aprendizaje contribuyen a la adquisición de las siguientes competencias para el estudiante:

BÁSICAS Y GENERALES

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

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

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

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

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

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

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



Asignatura: Profundización en los Métodos de la Química Teórica
Código: 32529
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

TRANSVERSALES

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

ESPECÍFICAS

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

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

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

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

1.11a. Learning objectives

The purpose of this course is to provide students a deeper insight into the methods used in theoretical chemistry, with particular emphasis on students to deepen in the following aspects:

- Knowledge of the specific problems of quantum mechanical methods applied to large systems.
- Understanding and ability to discriminate between different analytical methods useful for solving one-electron and two-electron molecular integrals depending on the nature of these integrals.
- Understanding of the essential features of the numerical methods used to solve molecular integrals. As a result, ability to change parameters for each method in order to solve practical problems and to choose the most appropriate method for a specific problem.
- Detailed knowledge of some methods that accelerate the process of solving self-consistent equations.
- Knowledge of the fundamentals of local methods to evaluate the correlation energy.
- Detailed knowledge of the methodological grounds of most common methods
- Ability to estimate computational cost and scaling
- Estimation of the magnitude of the errors associated
- Ability to determine their applicability to a specific problem.
- Density functional theory: advanced math, functionals and recent concepts.
- Challenges for density functional theory.



Asignatura: Profundización en los Métodos de la Química Teórica
Código: 32529
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

1.11b. Skills

These learning objectives contribute to provide the following skills for the students:

BASIC AND GENERAL SKILLS

CB6 - To possess and understand knowledge that provides a basis or opportunity to be original in the development and/or application of ideas, often in a research context.

CB7 - That students know how to apply the acquired knowledge and their ability to solve problems in new or unfamiliar environments within broader (or multidisciplinary) contexts related to their area of study.

CB8 - That students are able to integrate knowledge and face the complexity of making judgments from information that, incomplete or limited, includes reflections on the social and ethical responsibilities linked to the application of their knowledge and judgments.

CB9 - That students know how to communicate their conclusions and the knowledge and ultimate reasons that sustain them to specialized and non-specialized audiences in a clear and unambiguous way.

CB10 - That students have the learning skills that allow them to continue studying in a way that will be largely self-directed or autonomous.

CG01 - That students are able to promote, in academic and professional contexts, technological and scientific advancement within a society based on knowledge and respect for: a) fundamental rights and equal opportunities between men and women, b) the principles of equal opportunities and universal accessibility for people with disabilities, and c) the values of a culture of peace and democratic values.

CG02 - That students are able to solve problems and make decisions of any kind under the commitment to the defense and practice of equality policies.

TRANVERSAL SKILLS

CT02 - That students are organized at work demonstrating that they know how to manage the time and resources available.

SPECIFIC SKILLS

CE01- Students demonstrate their knowledge and understanding of the facts by applying concepts, principles and theories related to the Theoretical Chemistry and Computational Modeling.

CE04 - To understand the theoretical and practical foundations of computational techniques with which they can analyze the electronic, morphological and structural structure of a compound and properly interpret the results.



Asignatura: Profundización en los Métodos de la Química Teórica
Código: 32529
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

CE15 - To understand the basic principles of "ab initio" methodologies and Density Functional Theory.

CE16 - Students are able to discern between the different existing methods and know how to select the most appropriate method for each problem.

1.12. Contenidos del programa / Course contents

- Integrales moleculares monoeléctricas. Propiedades y técnicas de cálculo analíticas y numéricas.
- Integrales moleculares bielectrónicas. Screening, métodos directos, técnicas de descomposición. Métodos pseudoespectrales. Aplicación del desarrollo multipolar.
- Ecuaciones SCF. Convergencia. Métodos adaptados a matrices dispersas.
- Eficiencia y escalado de los métodos. Coste computacional.

- Introducción a la correlación electrónica.
- Métodos basados en la función de onda:
 - Interacción de configuraciones
 - Coupled Cluster
 - Teoría de Perturbaciones. Métodos MPn
 - Métodos multireferenciales
- Bases para el cálculo de la energía de correlación.
- Introducción a los métodos explícitamente correlacionados.
- Métodos locales de correlación electrónica.
- Sistemas Intermoleculares. Métodos de partición de la energía de interacción.

- Teoría del Funcional de la Densidad (DFT)
- Desarrollo de funcionales de intercambio-correlación: LDA, GGA, híbridos e ideas recientes
- Condiciones exactas, conexión adiabática y otras aproximaciones
- Autoenergías Kohn-Sham y el método OEP
- Extensión a sistemas con un número no entero de partículas y espín: error de deslocalización electrónica y error de correlación estática
- DFT dependiente del tiempo: respuesta lineal y propagación explícita en el tiempo
- Grandes retos de las aproximaciones más populares en DFT: sistemas fuertemente correlacionados
- El funcional exacto de DFT

- One-electron molecular integrals. Properties and analytical and numerical techniques.
- Two-electron molecular integrals. Screening, direct methods, decomposition techniques. Pseudospectral methods. Use of multipolar expansion.
- SCF Equations. Convergence. Methods adapted to sparse matrices.
- Efficiency of the method and scaling. Computational Cost.

- Introduction to electron correlation.



Asignatura: Profundización en los Métodos de la Química Teórica
Código: 32529
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

- Wavefunction-based methods:
 - Configuration Interaction
 - Coupled Cluster
 - Perturbation theory. MPn methods
 - Multireference methods
- Basis sets for electron correlation
- Introduction to explicitly correlated methods.
- Local methods for electron correlation.
- Intermolecular systems. Interaction energy partitioning methods.

- Density Functional Theory (DFT)
 - Exchange-correlation functional development: from LDA, GGA, hybrids to recent ideas
 - Exact conditions, adiabatic connection and other approaches
 - Kohn-Sham eigenvalues and the OEP method
 - Extension of DFT to fractional particle numbers and fractional spins: delocalization error and static correlation error
 - Time dependent DFT: linear response and explicit time propagation
 - Challenges for currently used approximations in DFT: strong correlation
 - The exact energy functional of DFT

1.13. Referencias de consulta / Course bibliography

F. Jensen, *Introduction to Computational Chemistry*, John Wiley & Sons, Chichester, **1999**

D. B. Cook, *Handbook of Computational Quantum Chemistry*, Oxford University Press, Oxford, **1998**

A. Szabo and N. S. Ostlund, *Modern Quantum Chemistry*, Dover publications Mineola, **1996**

T. Helgaker and P. R. Taylor, *Gaussian basis sets and molecular integrals*, World Scientific, Singapore, **1995**

D. R. Yarkony (Ed.) *Direct Methods in Electronic Structure Theory, Vol. part I*, World Scientific, Singapore, **1995**

Helgaker, T., Jørgensen, P., Olsen, J.; *Molecular Electronic-Structure Theory*. John Wiley & Sons Ltd, 2000.

Roos, B. Editor; *Lecture notes in quantum chemistry: European summer school in quantum chemistry*. Springer-Verlag 1994. Chapters on CC, CI, MCSCF, calibration.



Asignatura: Profundización en los Métodos de la Química Teórica
Código: 32529
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

Robert G. Parr and Weitao Yang: Density Functional Theory for Atoms and Molecules. Oxford University Press, 1994.

A. J. Cohen, P. Mori-Sánchez and W. Yang, Challenges for Density Functional Theory, Chemical Reviews, 112, 208 (2012).

Dreizler and Gross, Density Functional Theory: An approach to the quantum many-body problem, Springer-Verlag (1990)

Axel Becke, Perspective: Fifty years of density-functional theory in chemical physics J. Chem. Phys. 140, 18A301 (2014)

2. Métodos docentes / Teaching methodology

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

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

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

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

Lecture: The Professor will deliver face-to-face, or, online video lectures about the theoretical contents of the course during two-hour sessions. The presentations will be based on the different materials available at the Moodle platform.

Network teaching: All the tools available at the Moodle website (<https://posgrado.uam.es>) will be used (uploading of teaching materials, utilization of work team strategies, wiki, blogs, e-mail, etc.).

Tutoring sessions: The professor can organize either individual or group tutoring sessions about particular topics and questions raised by students.

Online Seminars: After the lecturing period, online seminars between the Professor and the students will be arranged at the *virtual classroom* in order to discuss the



Asignatura: Profundización en los Métodos de la Química Teórica
 Código: 32529
 Centro: Facultad de Ciencias
 Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
 Nivel: Máster
 Tipo: Formación Optativa
 N° de créditos: 5 ECTS

results being obtained, the potential problems and difficulties in using the various methodologies as well as to supervise the preparation of the required reports.

3. Tiempo de trabajo del estudiante / Student workload

Presencial:

Clases teóricas en aula / aula virtual20 horas
 Seminarios.....15 horas

No Presencial:

Estudio autónomo individual o en grupo.....40 horas
 Preparación de seminarios.....20 horas
 Elaboración de una memoria con ejercicios planteados en clase.....30 horas

TOTAL (5 ECTS * 25 horas/ECTS).....125 horas

Contact hours:

Theoretical lessons in classroom / virtual classroom20 hours
 Seminars.....15 hours

Independent study hours:

self-study or group study40 hours
 Preparation of seminars, assigned tasks and study.....20 hours
 Elaboration of a memory based on the exercises proposed in class.....30 hours

TOTAL (5 ECTS * 25 hours/ECTS).....125 hours

4. Métodos de evaluación y porcentaje en la calificación final / Evaluation procedures and weight of components in the final grade

Convocatoria ordinaria

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

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



Asignatura: Profundización en los Métodos de la Química Teórica
Código: 32529
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

- 90 % la memoria presentada por el estudiante,
- 10 % la discusión que sobre la misma se realice con el profesor en tutorías y seminarios.

Convocatoria extraordinaria

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

Ordinary assessment

The knowledge acquired by the student will be evaluated along the course. The educational model to follow will emphasize a continuous effort and advance in training and learning.

The final student mark will be based on exercises that must be done during the course. The next criteria will be followed for assessment of student exercises:

- 90% from the student report,
- 10% from discussions between the student and professor in tutoring sessions and seminars.

Extraordinary assessment

Contents that were failed in the ordinary assessment will be re-assessed through written reports focused on those contents. They will be done personally by the student in a fixed time period.

5. Cronograma* / Course calendar

Por favor, comprobar el horario oficial publicado en la página web del Máster.
Please, check the official schedule posted on the master website.

*Este cronograma tiene carácter orientativo

*This course calendar is orientative



Asignatura: Dinámica de las Reacciones Químicas
Código: 30576
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

1. ASIGNATURA / COURSE TITLE

Dinámica de las Reacciones Químicas / [Dynamics of the Chemical Reactions](#)

1.1. Código / Course number

30576

1.2. Materia / Content area

Módulo 5. Optatividad / [Module 5. Optional courses](#)

1.3. Tipo / Course type

Optativa / [Elective subject](#)

1.4. Nivel / Course level

Máster / [Master](#)

1.5. Curso / Year

1º / 1st

1.6. Semestre / Semester

2º / 2nd

1.7. Número de créditos / Credit allotment

5 créditos ECTS / [5 ECTS credits](#)

1.8. Requisitos previos / Prerequisites

No hay requisitos previos / [There are no previous prerequisites](#)

1.9. Requisitos mínimos de asistencia a las sesiones presenciales / Minimum attendance requirement

La asistencia a las clases es obligatoria / [Attendance is mandatory](#)



Asignatura: Dinámica de las Reacciones Químicas
Código: 30576
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

1.10. Datos del equipo docente / Faculty data

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Pablo Gamallo (Coordinador / Coordinator)
Departamento de Ciencia de Materials y Química Física / **Department of Materials Science and Chemical Physics**
Universidad de Barcelona / **University of Barcelona**
Correo electrónico/**Email**: gamallo@ub.edu
Página web/**Website**: <http://www4.ub.edu/rsogroup/>
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: contact by email

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Susana Gómez
Departamento de Química Física / **Department of Physical Chemistry**
Universidad de Salamanca / **University of Salamanca**
Correo electrónico/**Email**: susana.gomez@usal.es
Página web/**Website**: <http://campus.usal.es/~dinmol/>
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: contact by email

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Xavier Giménez
Departamento de Ciencia de Materials y Química Física / **Department of Materials Science and Chemical Physics**
Universidad de Barcelona / **University of Barcelona**
Correo electrónico/**Email**: xgimenez@ub.edu
Página web/**Website**: <http://www.ub.edu/rsogroup>
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: contact by email

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Fermín Huarte
Departamento de Ciencia de Materials y Química Física / **Department of Materials Science and Chemical Physics**
Universidad de Barcelona / **University of Barcelona**
Correo electrónico/**Email**: fermin.huarte@ub.edu
Página web/**Website**: <http://www.ub.edu/dept-qp/personal/fhuarte.html>
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: contact by email

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Rodrigo Martínez
Departamento de Química / **Department of Chemistry**
Universidad de La Rioja / **University of La Rioja**
Correo electrónico/**Email**: rodrigo.martinez@unirioja.es
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: contact by email

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Saulo Vázquez
Departamento de / **Department of Physical Chemistry**
Universidad de / **University of Santiago de Compostela**
Correo electrónico/**Email**: saulo.vazquez@usc.es
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: contact by email



Asignatura: Dinámica de las Reacciones Químicas
Código: 30576
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

1.11. Objetivos del curso / Course objectives

1.11a. Resultados del aprendizaje

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

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

1.11b. Competencias

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

BÁSICAS Y GENERALES

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

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

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

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

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

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



Asignatura: Dinámica de las Reacciones Químicas
Código: 30576
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

TRANSVERSALES

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

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

ESPECÍFICAS

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

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

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

1.11a. Learning objectives

Chemical Reaction Dynamics is the area of science that links the macroscopic measurements performed in the reaction kinetics studies with the individual molecular collisions that are behind any chemical process. The goal of the present course is to provide to the students an overview of this branch of the Chemical Physics. Special emphasis will be put on the following aspects of the subject:

- Relationship between microscopic and macroscopic observables.
- Features, properties and limitations of the theoretical methods most commonly employed in Reaction Dynamics.
- Reaction mechanisms at a molecular level.
- Experimental techniques.

1.11b. Skills

These learning objectives contribute to provide the following skills for the students:

BASIC AND GENERAL SKILLS

CB6 - Students possess and understand knowledge that provides a basis or opportunity to be original in the development and/or application of ideas, often in a research context.



Asignatura: Dinámica de las Reacciones Químicas
Código: 30576
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

CB7 - Students know how to apply the acquired knowledge and their problem solving capacity in new or little known environments within broader (or multidisciplinary) contexts related to their area of study.

CB9 - Students know how to communicate their conclusions and the knowledge and reasons that support them to specialized and non-specialized audiences in a clear and unambiguous way.

CB10 - Students possess the learning skills that allow them to continue studying in a way that will be self-directed or autonomous.

CG01 - Students are able to foster, in academic and professional contexts, technological and scientific progress within a society based on knowledge and respect for: a) fundamental rights and equal opportunities between men and women, b) The principles of equal opportunities and universal accessibility for persons with disabilities, and c) the values of a culture of peace and democratic values.

CG04 - Students develop a critical thinking and reasoning and know how to communicate them in an egalitarian and non-sexist way both in oral and written form, in their own language and in a foreign language.

CROSS-COMPREHENSIVE SKILLS

CT01 - Students are able to adapt their selves to different cultural environments by demonstrating that they are able to respond to change with flexibility.

CT03 - Students have the ability of analyze and synthesize in such a way that they can understand, interpret and evaluate the relevant information by assuming with responsibility their own learning or, in the future, the identification of professional exits and employment fields.

SPECIFIC SKILLS

CE01- Students demonstrate their knowledge and understanding of the facts applying concepts, principles and theories related to the Theoretical Chemistry and Computational Modeling.

CE05 - Students have the ability to handle the main sources of scientific information related to Theoretical Chemistry and Computational Modeling. They are able to search for relevant information in web pages of structural data, physical chemical experimental data, databases of molecular calculations, databases of scientific bibliography and scientific works.

CE26 - Students are able to relate macroscopic observations carried out within the field of Chemical Kinetics with individual collisions taking place at the molecular level.



Asignatura: Dinámica de las Reacciones Químicas
 Código: 30576
 Centro: Facultad de Ciencias
 Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
 Nivel: Máster
 Tipo: Formación Optativa
 N° de créditos: 5 ECTS

1.12. Contenidos del programa / Course contents

- Definición y objeto de la Dinámica de Reacciones Químicas
- Tipos de colisiones. Análisis clásico.
- Scattering y potencial: caso elástico. Observables experimentales.
- Dinámica molecular de reacciones: conceptos introductorios de la dinámica molecular de reacciones. Tipos de colisiones moleculares. Ángulo de dispersión. Velocidad de reacción y sección eficaz. Función excitación. Función opacidad. Sección eficaz diferencial. Métodos teóricos en dinámica de colisiones: métodos cuánticos y de trayectorias cuasi-clásicas (QCT). Observables experimentales. Mecanismo de las colisiones reactivas. Superficies de energía potenciales. Ejemplos: $\text{Cl} + \text{HI}$, $\text{F} + \text{H}_2$. Sesión práctica.
- Teorías de las velocidades de reacción: Introducción a la cinética química. Velocidad de reacción, constante de velocidad, orden de reacción y ecuaciones diferenciales de velocidad. Teoría del estado de transición convencional (TST): formulaciones estadística y termodinámica, cálculo de funciones de partición. Teoría variacional del estado de transición (VTST). Correcciones de efecto túnel. Sesión práctica: aplicación VTST a la reacción $\text{H} + \text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH} \rightarrow \text{H}_2 + \text{CH}_3\text{CHOH}$.
- Métodos automáticos para la predicción de mecanismos de reacción. Simulación de reacciones químicas acopladas mediante Monte Carlo cinético. Sesión práctica: descomposición unimolecular del ácido fórmico.
- Dinámica Molecular: Las ecuaciones clásicas del movimiento. Algoritmos de integración numérica. Condiciones periódicas de contorno. Tipos de colectivos. Termostatos y baróstatos. Campos de fuerzas: tipos y su coste computacional. Ejemplos. Sesión práctica.
- Estudio teórico del mecanismo y cinética de reacciones enzimáticas: Revisión de la mecánica cuántica / mecánica molecular (QM/MM). Superficies de energía potencial QM/MM. Dinámica molecular QM/MM: método de muestreo del paraguas. EA-VTST/MT: cálculo de la constante de velocidad en reacciones enzimáticas. Ejemplos: reacciones de la proteasa HCV NS3/NS4A. Sesión práctica.
- Cálculo de los coeficientes cinéticos de las reacciones químicas mediante la dinámica cuántica: Constantes de velocidad a partir de funciones de correlación de flujo. Estados propios de flujo térmico: interpretación física. Método multiconfiguracional dependiente del tiempo de Hartree (MCTDH). Cálculos politámicos de referencia. Ejemplos: $\text{H} + \text{CH}_4$, $\text{N} + \text{N}_2$.
- Dinámica cuántica de paquetes de onda: visión general y aplicaciones a reacciones químicas. Introducción a la dinámica de reacción. Dispersión cuántica. Propagadores. Observables. Matriz S. Paquete de ondas. Representaciones. Hamiltoniano Método del paquete de onda real. Ejemplos: $\text{He} + \text{HeH}^+$, $\text{Ne} + \text{H}_2^+$ y $\text{H} + \text{OH}$. Sesión práctica.



Asignatura: Dinámica de las Reacciones Químicas
 Código: 30576
 Centro: Facultad de Ciencias
 Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
 Nivel: Máster
 Tipo: Formación Optativa
 N° de créditos: 5 ECTS

- Molecular reaction dynamics: Introductory concepts of molecular reaction dynamics. Types of molecular collisions. Scattering angle. Reaction rate and cross-section. Excitation function. Opacity function. Differential cross-section. Theoretical methods in collision dynamics: quantum and quasi-classical trajectory (QCT) methods. Experimental observables. Mechanism of reactive collisions. Potential energy surfaces. Examples: $\text{Cl} + \text{HI}$, $\text{F} + \text{H}_2$. Hands-on session.
- Reaction rate theories: Introduction to chemical kinetics. Reaction rate, rate constant, reaction order, and differential rate equations. Conventional transition state theory (TST): statistical and thermodynamic formulations, calculation of partition functions. Variational transition state theory (VTST). Tunneling corrections. Hands-on session: VTST calculations for $\text{H} + \text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH} \rightarrow \text{H}_2 + \text{CH}_3\text{CHOH}$.
- Automated methods for predicting reaction mechanisms. Simulation of coupled chemical reactions by Kinetic Monte Carlo. Hands-on session: Unimolecular decomposition of formic acid.
- Molecular Dynamics: The classical equations of motion. Numerical integration algorithms. Periodic boundary conditions. Types of ensembles. Thermostats and barostats. Force fields: types and their computational cost. Examples. Hands-on session.
- Theoretical study of the mechanism and kinetics of enzyme reactions: Review of quantum mechanics/molecular mechanics (QM/MM) approach. QM/MM potential energy surfaces. QM/MM molecular dynamics: umbrella sampling method. EA-VTST/MT: rate constant calculation in enzyme reactions. Examples: HCV NS3/NS4A protease reactions. Hands-on session.
- Calculating kinetic coefficients of chemical reactions using quantum dynamics: Rate constants from flux correlation functions. Thermal flux eigenstates: physical interpretation. Multiconfigurational time-dependent Hartree method (MCTDH). Benchmark polyatomic calculations. Examples: $\text{H} + \text{CH}_4$, $\text{N} + \text{N}_2$.
- Wave-packet quantum dynamics: overview and applications to chemical reactions. Introduction to reaction dynamics. Quantum scattering. Propagators. Observables. S-matrix. Wave-packet. Representations. Hamiltonian. Real wave-packet method. Examples: $\text{He} + \text{HeH}^+$, $\text{Ne} + \text{H}_2^+$ and $\text{H} + \text{OH}$. Hands-on session.

1.13. Referencias de consulta / Course bibliography

- 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.



Asignatura: Dinámica de las Reacciones Químicas
 Código: 30576
 Centro: Facultad de Ciencias
 Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
 Nivel: Máster
 Tipo: Formación Optativa
 N° de créditos: 5 ECTS

- 4.- "Theory of Chemical Reaction Dynamics", Michael Baer (Ed.), Vol IV, CRC Press, 1985.
- 5.- "Molecular collision theory", M. S. Child, Academic Press, Inc., New York, 1974.
- 6.- "Understanding molecular simulation", D. Frenkel and B. Smit, Academic Press, 2002.
- 7.- "Chemical kinetics", K.J. Laidler, Harper&Row, 1987.
- 8.- "Introduction to QM/MM simulations", Gerrit Groenhof in "Methods in Molecular Biology" (Clifton, N.J.) 924, 2013, pg. 43-66.

2. Métodos docentes / Teaching methodology

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

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

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

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

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

Lecture: The Professor will deliver face-to-face, or, online video lectures about the theoretical contents of the course during two-hour sessions. The presentations will be based on the different materials available at the Moodle platform.

Network teaching: All the tools available at the Moodle website (<https://posgrado.uam.es>) will be used (uploading of teaching materials, utilization of work team strategies, wiki, blogs, e-mail, etc.).

Tutoring sessions: The professor can organize either individual or group tutoring sessions about particular topics and questions raised by students.



Asignatura: Dinámica de las Reacciones Químicas
 Código: 30576
 Centro: Facultad de Ciencias
 Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
 Nivel: Máster
 Tipo: Formación Optativa
 N° de créditos: 5 ECTS

Online Seminars: After the lecturing period, online seminars between the Professor and the students will be arranged at the *virtual classroom* in order to teach some subjects and also to discuss the results being obtained, the potential problems and difficulties in using the various methodologies as well as to supervise the preparation of the required reports.

Lecture classes in the computing lab: Teaching will be done in a computer lab, Two hours lectures will include an introduction, a theory to introduce the basic concepts and practical work. Student will learn through practicing. During the practical sessions the student will develop his own programs.

3. Tiempo de trabajo del estudiante / Student workload

Presencial:

Clases teóricas en aula / aula virtual35 horas

No Presencial:

Estudio autónomo individual o en grupo.....50 horas

Elaboración de una memoria con ejercicios planteados en clase.....40 horas

TOTAL (5 ECTS * 25 horas/ECTS)..... 125 horas

Contact hours:

Theoretical lessons in classroom / virtual classroom 35 hours

Independent study hours:

self-study or group study50 hours

Elaboration of a memory based on the exercises proposed in class.....40 hours

TOTAL (5 ECTS * 25 hours/ECTS).....125 hours

4. Métodos de evaluación y porcentaje en la calificación final / Evaluation procedures and weight of components in the final grade

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.



Asignatura: Dinámica de las Reacciones Químicas
Código: 30576
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

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

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

Convocatoria extraordinaria

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

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

Ordinary assessment

The knowledge acquired by the student will be evaluated along the course. The educational model to follow will emphasize a continuous effort and advance in training and learning. The final student mark will be based on exercises that must be done during the course. There will also be an exam at the end. The next criteria will be followed for the assessment of the final mark:

- 80% Completion of requested tasks
- 20% Final exam

Extraordinary assessment

The student will have to face a final exam, including both theory and practical exercises over all subjects included. The student mark will be obtained from:

- 50% Final exam
- 50% Completion of requested tasks

5. Cronograma* / Course calendar

Por favor, comprobar el horario oficial publicado en la página web del Máster.
Please, check the official schedule posted on the master website.

*Este cronograma tiene carácter orientativo

*This course calendar is orientative



Asignatura: Estados Excitados
Código: 31246
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Master en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

1. ASIGNATURA / **COURSE TITLE**

Estados Excitados / [Excited States](#)

1.1. Código / **Course number**

31246

1.2. Materia / **Content area**

Módulo 3. Optatividad / [Module 3. Optional courses](#)

1.3. Tipo / **Course type**

Optativa / [Elective subject](#)

1.4. Nivel / **Course level**

Máster / [Master](#)

1.5. Curso / **Year**

1º / [1st](#)

1.6. Semestre / **Semester**

Anual / [Annual](#)

1.7. Número de créditos / **Credit allotment**

5 créditos ECTS / [5 ECTS credits](#)

1.8. Requisitos previos / **Prerequisites**

No hay requisitos previos / [There are no previous prerequisites](#)

1.9. Requisitos mínimos de asistencia a las sesiones presenciales / **Minimum attendance requirement**

La asistencia a las clases es obligatoria / [Attendance is mandatory](#)



Asignatura: Estados Excitados
Código: 31246
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Master en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

1.10. Datos del equipo docente / Faculty data

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Jesús González Vázquez (Coordinador)
Departamento de Química / **Department of Chemistry**
Facultad de Ciencias / **Faculty of Sciences**
Universidad Autónoma de Madrid
Despacho - Módulo / **Office - Module**: 13 -308
Teléfono / **Phone**: 91 497 3008
Correo electrónico/**Email**: jesus.gonzalezv@uam.es
Página web/**Website**: <https://moodle.uam.es/>
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: contact by email

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Adolfo Bastida Pascual
Departamento de Química Física / **Department of Physical Chemistry**
Facultad de Química / **Faculty of Chemistry**
Universidad de Murcia
Correo electrónico/**Email**: bastida@um.es
Página web/**Website**: <http://www.um.es/web/quimica-fisica/>
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: 9:00-11:00 (L-V)

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Alberto Castro
Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos (BIFI)
Universidad de Zaragoza / **University of Zaragoza**
Teléfono / **Phone**: 876 55 53 54
Correo electrónico/**Email**: acastro@bifi.es
Página web/**Website**: <http://bifi.es/~acastro>
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: contact by email

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Daniel Roca
Theoretical Chemistry Group
Institute of Molecular Science (ICMol)
Correo electrónico/**Email**: daniel.roca@uv.es
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: contact by email

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Lara Martínez Fernández
Departamento de Química / **Department of Chemistry**
Facultad de Ciencias / **Faculty of Sciences**
Universidad Autónoma de Madrid
Correo electrónico/**Email**: lara.martfernandez@gmail.com
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: contact by email

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Basile Curchod
Durham **University**
Correo electrónico/**Email**: basile.f.curchod@durham.ac.uk
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: contact by email



Asignatura: Estados Excitados
Código: 31246
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Master en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

1.11. Objetivos del curso / Course objectives

1.11a. Resultados del aprendizaje

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

1.11b. Competencias

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

BÁSICAS Y GENERALES

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

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

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

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

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

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

TRANSVERSALES

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



Asignatura: Estados Excitados
Código: 31246
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Master en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

ESPECÍFICAS

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

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

1.11a. Learning objectives

The present course aims to familiarize students with the treatment of both rovibrational and electronic excited states. At the end of the course, the student is expected to know the foundations of the most popular methods and to be able to manage the most frequently used programs for the treatment of excited states.

1.11b. Skills

These learning objectives contribute to provide the following skills for the students:

BASIC AND GENERAL SKILLS

CB6 - Students possess and understand knowledge that provides a basis or opportunity to be original in the development and/or application of ideas, often in a research context.

CB7 - Students know how to apply the acquired knowledge and their problem solving capacity in new or little known environments within broader (or multidisciplinary) contexts related to their area of study.

CB9 - Students know how to communicate their conclusions and the knowledge and reasons that support them to specialized and non-specialized audiences in a clear and unambiguous way.

CB10 - Students possess the learning skills that allow them to continue studying in a way that will be self-directed or autonomous.

CG01 - Students are able to foster, in academic and professional contexts, technological and scientific progress within a society based on knowledge and respect for: a) fundamental rights and equal opportunities between men and women, b) The principles of equal opportunities and universal accessibility for persons with disabilities, and c) the values of a culture of peace and democratic values.

CG04 - Students develop a critical thinking and reasoning and know how to communicate them in an egalitarian and non-sexist way both in oral and written form, in their own language and in a foreign language.



Asignatura: Estados Excitados
Código: 31246
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Master en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

CROSS-COMPREHENSIVE SKILLS

CT03 - Students have the ability of analyze and synthesize in such a way that they can understand, interpret and evaluate the relevant information by assuming with responsibility their own learning or, in the future, the identification of professional exits and employment fields

SPECIFIC SKILLS

CE04 - Students understand the theoretical and practical bases of computational techniques with which they can analyze the electronic, morphological and structural structure of a compound and interpret the results adequately.

CE27 - Students are familiar with the fundamentals of the methods used to treat excited states and are able to handle the most frequently used programs for the treatment of excited states.

1.12. Contenidos del programa / Course contents

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.



Asignatura: Estados Excitados
 Código: 31246
 Centro: Facultad de Ciencias
 Titulación: Master en Química Teórica y Modelización Computacional
 Nivel: Máster
 Tipo: Formación Optativa
 N° de créditos: 5 ECTS

- 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.

1. Potential energy surfaces

- Born-Oppenheimer approximation
- Potential energy curves for diatomic molecules
- Potential energy surfaces for polyatomic molecules.

2. Interaction radiation-matter

- Classical model for electromagnetic radiation
- Transition probabilities induced by radiation

3. Rovibrational spectra.

- Diatomic molecules: energy levels, selection rules.
- Pure rotational spectra and rovibrational spectra in diatomic molecules
- Polyatomic molecules: classical vibrations and quantum vibrations.
- Rovibrational spectra in polyatomic molecules
- Vibrational relaxation in liquids: experimental methods and theoretical treatments.

4. Basic Concepts in Modern Molecular Photochemistry

- Light absorption: (Electromagnetic radiation, the Lambert-Beer law, Absorption spectra, Franck-Condon principle, Transition dipole moment, Classical and quantum mechanical harmonic oscillator, Selection rules, Electronic transitions)
- Deactivation of excited states: (Energy and electron transfer, Jablonski diagrams, Vibrational relaxation, Radiative and non radiative transitions,



Asignatura: Estados Excitados
 Código: 31246
 Centro: Facultad de Ciencias
 Titulación: Master en Química Teórica y Modelización Computacional
 Nivel: Máster
 Tipo: Formación Optativa
 N° de créditos: 5 ECTS

- Franck-Condon principle for radiationless transitions, the Energy gap law, Time scales and quantum yields, Fermi's golden rule)
- Excited potential energy surfaces: (surface crossings, photochemical reaction paths, Examples).
5. Quantum Chemical Calculations of Excited States: Multiconfigurational Methods.
 - Electron correlation in molecules.
 - Electronic Structure methods for excited states. Monoconfigurational vs. multiconfigurational methods. CASSCF and RASSCF methods. Choice of the active space. Single vs. state-average calculations. Basis sets considerations.
 - Introducing dynamical correlation: the CASPT2 method.
 - CASPT2 problems and solutions: intruder states, avoided crossings and valence-Rydberg mixing. The level shift technique and Multistate-CASPT2.
 - Examples.
 6. Quantum Chemical Calculations of Excited States: TD-DFT Methods.
 - DFT, Runge-Gross theorems, linear response TDDFT, propagation of the electronic density.
 - Spectra calculation, approximation of xc-functionals,
 - Examples.
 7. Dynamics simulations: Wave Packet propagations.
 - Time-evolution operator, Propagation, Relaxation method, Filtering method. Interaction with an electric field. Correlation functions, Spectra and eigenfunctions. Pump-probe spectroscopy and control.
 8. TD-DFT for ultrafast dynamics.
 - Ab initio molecular dynamics: Born-Oppenheimer and Ehrenfest dynamics. Nonadiabatic dynamics, Tully's surface hopping. Examples of nonadiabatic ab initio molecular dynamics. Addition of environmental effects: Electromagnetic fields and solvents.

1.13. Referencias de consulta / Course bibliography

- 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).



Asignatura: Estados Excitados
Código: 31246
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Master en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

- 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).

2. Métodos docentes / Teaching methodology

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

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

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

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



Asignatura: Estados Excitados
 Código: 31246
 Centro: Facultad de Ciencias
 Titulación: Master en Química Teórica y Modelización Computacional
 Nivel: Máster
 Tipo: Formación Optativa
 N° de créditos: 5 ECTS

Lectures: The Professor will deliver lectures about the theoretical contents of the course during two-hour sessions. The presentations will be based on the different materials available at the Moodle platform.

Network teaching: All the tools available at the Moodle website (<https://posgrado.uam.es>) will be used (uploading of teaching materials, utilization of work team strategies, wiki, blogs, e-mail, etc.).

Tutoring sessions: The professor can organize either individual or group tutoring sessions about particular topics and questions raised by students.

Online Seminars: After the lecturing period, online seminars between the Professor and the students will be arranged at the *virtual classroom* in order to discuss the results being obtained, the potential problems and difficulties in using the various methodologies as well as to supervise the preparation of the required reports.

3. Tiempo de trabajo del estudiante / Student workload

Presencial:

Clases teóricas en aula / aula virtual35 horas

No Presencial:

Estudio autónomo individual o en grupo.....50 horas

Elaboración de una memoria con ejercicios planteados en clase.....40 horas

TOTAL (5 ECTS * 25 horas/ECTS).....125 horas

Contact hours:

Theoretical lessons in classroom / virtual classroom35 hours

Independent study hours:

self-study or group study50 hours

Elaboration of a memory based on the exercises proposed in class.....40 hours

TOTAL (5 ECTS * 25 hours/ECTS).....125 hours



Asignatura: Estados Excitados
Código: 31246
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Master en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

4. Métodos de evaluación y porcentaje en la calificación final / Evaluation procedures and weight of components in the final grade

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

Convocatoria extraordinaria

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

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

Ordinary assessment

The knowledge acquired by the student will be evaluated along the course. The educational model to follow will emphasize a continuous effort and advance in training and learning.

The final student mark will be based on exercises that must be done during the course. The next criteria will be followed for assessment of student exercises:

- 60% from the student report about the practical work and/or exercises.
- 40% discussion of the subject during the practical sessions, including a small written test (10%).

Extraordinary assessment

The student will have to face a final exam, including both theory and practical exercises. The student mark will be obtained from:

- 80% from the individual work.
- 20% from the final exam.



Asignatura: Estados Excitados
Código: 31246
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Master en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

5. Cronograma* / **Course calendar**

Por favor, comprobar el horario oficial publicado en la página web del Máster.
[Please, check the official schedule posted on the master website.](#)

*Este cronograma tiene carácter orientativo

[*This course calendar is orientative](#)



Asignatura: Láseres
Código: 32532
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

1. ASIGNATURA / COURSE TITLE

Láseres / [Lasers](#)

1.1. Código / Course number

32532

1.2. Materia / Content area

Módulo 3. Optatividad / [Module 3. Optional courses](#)

1.3. Tipo / Course type

Optativa / [Elective subject](#)

1.4. Nivel / Course level

Máster / [Master](#)

1.5. Curso / Year

1º / [1st](#)

1.6. Semestre / Semester

Anual / [Annual](#)

1.7. Número de créditos / Credit allotment

5 créditos ECTS / [5 ECTS credits](#)

1.8. Requisitos previos / Prerequisites

No hay requisitos previos / [There are no previous prerequisites](#)

1.9. Requisitos mínimos de asistencia a las sesiones presenciales / Minimum attendance requirement

La asistencia a las clases es obligatoria / [Attendance is mandatory](#)



Asignatura: Láseres
Código: 32532
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

1.10. Datos del equipo docente / Faculty data

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Fernando Martín García
Departamento de Química / **Department of Chemistry**
Facultad de Ciencias / **Faculty of Sciences**
Universidad Autónoma de Madrid
Despacho - Módulo / **Office - Module**: Modulo 13-304
Teléfono / **Phone**: +34 914974019
Correo electrónico/**Email**: fernando.martin@uam.es
Página web/**Website**:
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: Contact by email

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Alicia Palacios Cañas
Departamento de Química / **Department of Chemistry**
Facultad de Ciencias / **Faculty of Sciences**
Universidad Autónoma de Madrid
Despacho - Módulo / **Office - Module**: 307B
Teléfono / **Phone**: 91 497 3019
Correo electrónico/**Email**: alicia.palacios@uam.es
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: L-V, 09:00-18:00 (contactar previamente por e-mail) (**contact by email**)

1.11. Objetivos del curso / Course objectives

1.11a. Resultados del aprendizaje

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

1.11b. Competencias

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

BÁSICAS Y GENERALES

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

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

CB8 - Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o



Asignatura: Láseres
Código: 32532
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios.

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

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

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

TRANSVERSALES

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

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

ESPECÍFICAS

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

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

1.11a. Learning objectives

Understand the fundamentals of laser light and its main applications in quantum chemistry and atomic and molecular physics. Get familiar with the resolution of time-dependent problems and dealing with states in the continuum.

1.11b. Skills

These learning objectives contribute to provide the following skills for the students:



Asignatura: Láseres
Código: 32532
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

BASIC AND GENERAL SKILLS

CB6 - Students possess and understand knowledge that provides a basis or opportunity to be original in the development and/or application of ideas, often in a research context.

CB7 - Students know how to apply the acquired knowledge and their problem solving capacity in new or little known environments within broader (or multidisciplinary) contexts related to their area of study.

CB8 - Students are able to integrate knowledge and face the complexity of making judgments from information that, incomplete or limited, includes reflections on social and ethical responsibilities linked to the application of their knowledge and judgments.

CB9 - Students know how to communicate their conclusions and the knowledge and reasons that support them to specialized and non-specialized audiences in a clear and unambiguous way.

CB10 - Students possess the learning skills that allow them to continue studying in a way that will be self-directed or autonomous.

CG01 - Students are able to foster, in academic and professional contexts, technological and scientific progress within a society based on knowledge and respect for: a) fundamental rights and equal opportunities between men and women, b) The principles of equal opportunities and universal accessibility for persons with disabilities, and c) the values of a culture of peace and democratic values.

CROSS-COMPREHENSIVE SKILLS

CT03 - Students have the ability of analyze and synthesize in such a way that they can understand, interpret and evaluate the relevant information by assuming with responsibility their own learning or, in the future, the identification of professional exits and employment fields.

CT04 - Students are able to generate new ideas based on their own decisions.

SPECIFIC SKILLS

CE01- Students demonstrate their knowledge and understanding of the facts applying concepts, principles and theories related to the Theoretical Chemistry and Computational Modeling.

CE24 - Students know the fundamentals of lasers and are familiar with the resolution of time-dependent problems and the treatment of states of the continuum.

1.12. Contenidos del programa / Course contents

1. **Introducción.** ¿Qué es un láser? ¿Para qué se usa? Características de la luz láser.



Asignatura: Láseres
 Código: 32532
 Centro: Facultad de Ciencias
 Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
 Nivel: Máster
 Tipo: Formación Optativa
 N° de créditos: 5 ECTS

2. **Propiedades del láser.** Niveles de energía. Formación de líneas espectrales: coeficientes de Einstein. Emisión espontánea y estimulada. Inversión de población y saturación. Ensanchamiento de líneas espectrales. Ejemplos prácticos de láseres.
3. **Láseres de onda continua (cw) y láseres pulsados.** Generación de láseres de onda continua. Reducción del ancho de banda. Formación de láseres pulsados por Q switching y por modelocking.
4. **Interacción láser-materia.** Descripción clásica y cuántica. Procesos multifotónicos y efecto túnel. Modelo de los tres pasos. Generación de armónicos altos. Pulsos láseres de attosegundos y trenes de pulsos de attosegundos.
5. **Efectos de campo intenso.** Frecuencias de Rabi. Desplazamiento Stark. Ionización por encima del umbral (ATI). Estados vestidos. Estados de Volkov y de Floquet. Aproximación de campo intenso.
6. **Tratamientos teóricos.** Bases de estados en el continuo electrónico: Bsplines. Integración directa de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo. Métodos híbridos.
7. **Espectroscopía resuelta en el tiempo.** Esquemas de pump-probe con pulsos láser. Usos en femtoquímica y attofísica. Attoquímica.

1. **Introduction.** What is a laser? What are lasers used for? Characteristics of laser light.
2. **Laser properties.** Energy levels. Formation of spectral lines: Einstein's coefficients. Spontaneous and stimulated emission. Population inversion and saturation. Widening of spectral lines. Practical examples of lasers.
3. **Continuous wave lasers (cw) and pulsed lasers.** Generation of cw lasers. Bandwidth reduction. Formation of laser pulses by Q-switching and modelocking.
4. **Laser-matter interaction.** Classical and quantum description. Multiphoton processes and tunneling. Three-step model. High-order Harmonic Generation (HOHG). Attosecond lasers pulses and pulse trains.
5. **Strong field effects.** Rabi frequencies. Stark shifts. Above-threshold ionization (ATI). Dressed states. Floquet and Volkov states. Strong-field approximation.
6. **Theoretical approaches.** Basis of states in the electronic continuum: B-splines. Direct integration of the time-dependent Schrödinger equation. Hybrid methods.
7. **Time-resolved spectroscopy.** Pump-probe schemes with laser pulses. Uses in femtochemistry and attophysics. Attochemistry.

1.13. Referencias de consulta / Course bibliography

1. Introduction to Laser Technology. B. Hitz, J. J. Swing and J. Hecht. IEEE Press, New York, 2001.
2. Introduction to Quantum Optics. G. Grynberg, A. Aspect and C. Fabre. Cambridge University Press. Cambridge, 2010.
3. Principles of Lasers. O. Svelto. Plenum Press, New York. 1998.
4. Laser Fundamentals. W. T. Silfvast. Cambridge University Press, Cambridge, 2004.



Asignatura: Láseres
 Código: 32532
 Centro: Facultad de Ciencias
 Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
 Nivel: Máster
 Tipo: Formación Optativa
 N° de créditos: 5 ECTS

5. Quantum Optics. M. O. Scully. Cambridge University Press. Cambridge, 1997.
6. Lasers. A. E. Siegman. University Science Books. 1986.
7. Bachau H, Cormier E, Decleva P, Hansen J E and Martín F 2001 *Rep. Prog. Phys.* **64** 1815.
8. Martín F 1999 *J. Phys. B (Topical Review)* **32** R197

2. Métodos docentes / Teaching methodology

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

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

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

Lecture: The Professor will deliver face-to-face, or, online video lectures about the theoretical contents of the course during two-hour sessions. The presentations will be based on the different materials available at the Moodle platform.

Network teaching: All the tools available at the Moodle website (<https://posgrado.uam.es>) will be used (uploading of teaching materials, utilization of work team strategies, wiki, blogs, e-mail, etc.).

Tutoring sessions: The professor can organize either individual or group tutoring sessions about particular topics and questions raised by students.

3. Tiempo de trabajo del estudiante / Student workload

Presencial:

Clases teóricas en aula / aula virtual34 horas
 Seminarios.....10 horas
 Tutorías.....6 horas

No Presencial:

Estudio autónomo individual o en grupo.....35 horas
 Preparación de seminarios.....20 horas
 Elaboración de una memoria con ejercicios planteados en clase.....20 horas

TOTAL (5 ECTS * 25 horas/ECTS).....125 horas



Asignatura: Láseres
 Código: 32532
 Centro: Facultad de Ciencias
 Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
 Nivel: Máster
 Tipo: Formación Optativa
 N° de créditos: 5 ECTS

Contact hours:

Theoretical lessons in classroom / virtual classroom34 hours
 Seminars.....10 hours
 Tutoring.....6 hours

Independent study hours:

self-study or group study35 hours
 Preparation of seminars, assigned tasks and study.....20 hours
 Elaboration of a memory based on the exercises proposed in class.....20 hours

TOTAL (5 ECTS * 25 hours/ECTS).....125 hours

4. Métodos de evaluación y porcentaje en la calificación final / Evaluation procedures and weight of components in the final grade

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.

Ordinary assessment

The knowledge acquired by the student will be evaluated along the course. The educational model to follow will emphasize a continuous effort and advance in training and learning.



Asignatura: Láseres
Código: 32532
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

The final student mark will be based on exercises that must be done during the course. The next criteria will be followed for assessment of student exercises:

- 70% Exam at the end of the course.
- 30% from the student report.

Extraordinary assessment

The student will have to face a final exam, including both theory and practical exercises. The student mark will be obtained from:

- 70% from the final exam,
- 30% from the individual work.

5. Cronograma* / Course calendar

Por favor, comprobar el horario oficial publicado en la página web del Máster.
Please, check the official schedule posted on the master website.

*Este cronograma tiene carácter orientativo

*This course calendar is orientative



Asignatura: Linux y Linux de gestión
Código: 32530
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

1. ASIGNATURA / **COURSE TITLE**

Linux y Linux de gestión / [Linux and Linux system managing](#)

1.1 Código / **Course number**

32530

1.2 Materia / **Content area**

Módulo 3. Optatividad / [Module 3. Optional courses](#)

1.3 Tipo / **Course type**

Optativa / [Elective subject](#)

1.4 Nivel / **Course level**

Máster / [Master](#)

1.5 Curso / **Year**

1º / [1st](#)

1.6 Semestre / **Semester**

Anual / [Anual](#)

1.7 Número de créditos / **Credit allotment**

5 créditos ECTS / [5 ECTS credits](#)

1.8 Requisitos previos / **Prerequisites**

No hay requisitos previos / [There are no previous prerequisites](#)

1.9 Requisitos mínimos de asistencia a las sesiones presenciales / **Minimum attendance requirement**

La asistencia a las clases es obligatoria / [Attendance is mandatory](#)



Asignatura: Linux y Linux de gestión
Código: 32530
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

1.10 Datos del equipo docente / Faculty data

COORDINADOR: Docente(s) / [Lecturer\(s\)](#): Alberto Luna (Coordinador/[Coordinator](#))
Departamento de Química/ [Department of Chemistry](#)
Facultad de Ciencias / [Faculty of Sciences](#)
Despacho - Módulo / [Office - Module](#): C-08-107
Teléfono / [Phone](#): +39 91 497 4116
Correo electrónico/[Email](#): alberto.luna@uam.es
Horario de atención al alumnado/[Office hours](#): 9:00-13:00

Docente(s) / [Lecturer\(s\)](#): Pablo Sanz Mercado
Departamento de Química / [Department of Chemistry](#)
Facultad de Ciencias / [Faculty of Sciences](#)
Despacho - Módulo / [Office - Module](#): C-08-105
Teléfono / [Phone](#): +34 91 497 4167
Correo electrónico/[Email](#): pablo.sanz@uam.es
Página web/[Website](#):
<https://moles-reac.qui.uam.es/staff/psanz/>
Horario de atención al alumnado/[Office hours](#): 9:00-13:00

1.11 Objetivos del curso / Course objectives

1.11a. Resultados del aprendizaje

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 GNU/Linux. Esto incluye las operaciones cotidianas, seguridad, y también programación de Shell scripts para automatizar tareas con el objetivo de mantener un sistema de cálculo de complejidad media operativo con alta disponibilidad.

1.11b. Competencias

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

BÁSICAS Y GENERALES

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

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

CB8 - Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o



Asignatura: Linux y Linux de gestión
Código: 32530
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios.

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

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

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

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

TRANSVERSALES

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

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

1.11a. Learning objectives

The aim is to get a knowledge not only at user level but also at system management level of complex servers based in different flavours of GNU/Linux operating systems . This includes the daily operations, security hints, and scheduling shell scripts to automate tasks in order to maintain a computational cluster in high availability.

1.11b Skills

These results from learning contribute to the acquisition of the following skills:

GENERAL BASIS

CB6 - Possess and understand knowledge that provides a basis or opportunity to be original in the development and / or application of ideas, often in a research context.



Asignatura: Linux y Linux de gestión
Código: 32530
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

CB7 - Students should be able to apply acquired knowledge and problem solving skills in new or unfamiliar environments within broader (or multidisciplinary) contexts related to their area of study.

CB8 - Students will be able to integrate knowledge and face the complexity of making judgments based on information that, incomplete or limited, includes reflections on the social and ethical responsibilities related to the application of their knowledge and decisions.

CB9 - Students will have the skill of communicating their conclusions and the latest knowledge and reasons that support them to specialized and non-specialized audiences in a clear and unambiguous way.

CB10 - Students will have the learning skills that allow them to continue studying in a way that will be largely self-directed or autonomous.

CG01 - Students will be able to foster, in academic and professional contexts, technological and scientific progress within a society based on knowledge and respect for: a) fundamental rights and equal opportunities between men and women, b) The principles of equal opportunities and universal accessibility for people with disabilities and c) the values of a culture of peace and democratic values.

CG02 - Students are able to solve problems and make decisions of any kind under the commitment to the defense and practice of equality policies.

TRANSVERSAL/CROSS

CT02 - The student is organized at work demonstrating that he knows how to manage the time and resources available to him.

CT03 - The student has the ability to analyze and synthesise in such a way that he / she can understand, interpret and evaluate the relevant information by assuming with responsibility his / her own learning or, in the future, the identification of professional exits and employment fields.

1.12. Contenidos del programa / Course contents

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



Asignatura: Linux y Linux de gestión
Código: 32530
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

Hardware.
GNU/Linux operating Systems.
Different flavors of GNU/Linux systems.
Main commands.
Vi editor.
Filesystems.
System management.
Shell scripts programming.

1.13. Referencias de consulta / Course bibliography

Principios y administración de Linux. Pablo Sanz Mercado, Alberto Luna Fernández. UAM Ediciones, 2009.

Seguridad en Linux: Una guía práctica. Pablo Sanz Mercado. Colección cuadernos de apoyo, UAM Ediciones, 2008.

Programación de Shell scripts. Alberto Luna Fernández, Pablo Sanz Mercado. UAM ediciones, 2011.

Bash cookbook. Carl Albing, J.P. Vossen & Cameron Newwham. O'Reilly, 2007.

Unix system administration handbook. Evi Nemeth, Garth Snyder, Scott Seebass, Trent R. Hein. Ed. Prentice Hall, 2001.

Unix Power tools. Jerry Peek, Tim. Ed. O'Reilly, Mike Loukides. O'Reilly 1997.

2. Métodos docentes / Teaching methodology

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

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

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

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



Asignatura: Linux y Linux de gestión
 Código: 32530
 Centro: Facultad de Ciencias
 Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
 Nivel: Máster
 Tipo: Formación Optativa
 N° de créditos: 5 ECTS

Lecture: The Professor will deliver lectures about the theoretical contents of the course during two-hour sessions. The presentations will be based on the different materials available at the Moodle platform.

Teaching in computer room: Teaching will be conducted in a computer room. The classes, in sessions from two to five hours, will include a brief theoretical introduction, in which the teacher will present the basic concepts, followed by practical applications, in which the student will learn through the resolution of practical examples.

Online teaching: We will use the different tools offered by the platform Moodle (<https://posgrado.uam.es>). Publication of contents of the course, groupware tools, discussion forums, email.

Written reports: Orientation and supervision in the preparation of written reports.

3. Tiempo de trabajo del estudiante / Student workload

Presencial:

Clases teóricas en aula / aula virtual40 horas
 Tutorías.....10 horas

No Presencial:

Estudio autónomo individual o en grupo.....50 horas
 Elaboración de una memoria con ejercicios planteados en clase.....25 horas

TOTAL (5 ECTS * 25 horas/ECTS).....125 horas

Contact hours:

Theoretical lessons in classroom / virtual classroom40 hours
 Tutoring.....10 hours

Independent study hours:

self-study or group study50 hours
 Elaboration of a memory based on the exercises proposed in class.....25 hours

TOTAL (5 ECTS * 25 hours/ECTS).....125 hours



Asignatura: Linux y Linux de gestión
Código: 32530
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

4. Métodos de evaluación y porcentaje en la calificación final / Evaluation procedures and weight of components in the final grade

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.

Ordinary assessment

The knowledge acquired by the student will be evaluated along the course. The educational model to follow will emphasize a continuous effort and advance in training and learning.

The final student mark will be based on exercises that must be done during the course. The next criteria will be followed for assessment of student exercises:

- 100% from the student report,

Extraordinary assessment

The student will have to face a final exam, including both theory and practical exercises. The student mark will be obtained from:

- 70% from the final exam,
- 30% from the individual work.

Curso 2018-2019



Asignatura: Linux y Linux de gestión

Código: 32530

Centro: Facultad de Ciencias

Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional

Nivel: Máster

Tipo: Formación Optativa

Nº de créditos: 5 ECTS

5. Cronograma* / **Course calendar**

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

[Please, check the official schedule posted on the master website.](#)

*Este cronograma tiene carácter orientativo

[*This course calendar is orientative](#)



Asignatura: Fundamentos Matemáticos de la Mecánica Cuántica
Código: 32523
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

1. ASIGNATURA / **COURSE TITLE**

Fundamentos Matemáticos de la Mecánica Cuántica / **Mathematical Foundations of Quantum Mechanics**

1.1. Código / **Course number**

32523

1.2. Materia / **Content area**

Módulo 1. Fundamentos / **Module 1. Fundamental Course**

1.3. Tipo / **Course type**

Obligatoria / **Compulsory subject**

1.4. Nivel / **Course level**

Máster / **Master**

1.5. Curso / **Year**

1º / **1st**

1.6. Semestre / **Semester**

2º / **2nd**

1.7. Número de créditos / **Credit allotment**

5 créditos ECTS / **5 ECTS credits**

1.8. Requisitos previos / **Prerequisites**

No hay requisitos previos / **There are no previous prerequisites**

1.9. Requisitos mínimos de asistencia a las sesiones presenciales / **Minimum attendance requirement**

La asistencia a las clases es obligatoria / **Attendance is mandatory**



Asignatura: Fundamentos Matemáticos de la Mecánica Cuántica
Código: 32523
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

1.10. Datos del equipo docente / Faculty data

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Jesús González Vázquez (Coordinador)
Departamento de Química/ **Department of Chemistry**
Facultad de Ciencias / **Faculty of Sciences**
Universidad Autónoma de Madrid
Despacho - Módulo / **Office - Module**: Módulo 13-308
Teléfono / **Phone**: +34 91 497 3008
Correo electrónico/**Email**: jesus.gonzalezv@uam.es
Página web/**Website**:
<https://moodle.uam.es/>
Horario de atención al alumnado/**Office hours**:
Consulta por internet o concretar cita con el profesor por email
Ask the teacher by email to make an appointment

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Fernando Martín García
Departamento de Química / **Department of Chemistry**
Facultad de Ciencias / **Faculty of Sciences**
Universidad Autónoma de Madrid
Despacho - Módulo / **Office - Module**: Modulo 13-304
Teléfono / **Phone**: +34 914974019
Correo electrónico/**Email**: fernando.martin@uam.es
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: Contact by email

1.11. Objetivos del curso / Course objectives

1.11a. Resultados del aprendizaje

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

1.11b. Competencias

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

BÁSICAS Y GENERALES

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

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



Asignatura: Fundamentos Matemáticos de la Mecánica Cuántica
Código: 32523
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

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

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

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

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

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

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

TRANSVERSALES

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

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

ESPECÍFICAS

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

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

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



Asignatura: Fundamentos Matemáticos de la Mecánica Cuántica
Código: 32523
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

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

1.11a. Learning objectives

To understand the mathematical tools needed to develop the main methods in Quantum Mechanics and to understand the main concepts and applications.

1.11b. Skills

These learning objectives contribute to provide the following skills for the students:

BASIC AND GENERAL SKILLS

CB6 - Students possess and understand knowledge that provides a basis or opportunity to be original in the development and/or application of ideas, often in a research context.

CB7 - Students know how to apply the acquired knowledge and their problem solving capacity in new or little known environments within broader (or multidisciplinary) contexts related to their area of study.

CB8 - Students are able to integrate knowledge and face the complexity of making judgments from information that, incomplete or limited, includes reflections on social and ethical responsibilities linked to the application of their knowledge and judgments.

CB9 - Students know how to communicate their conclusions and the knowledge and reasons that support them to specialized and non-specialized audiences in a clear and unambiguous way.

CB10 - Students possess the learning skills that allow them to continue studying in a way that will be self-directed or autonomous.

CG01 - Students are able to foster, in academic and professional contexts, technological and scientific progress within a society based on knowledge and respect for: a) fundamental rights and equal opportunities between men and women, b) The principles of equal opportunities and universal accessibility for persons with disabilities, and c) the values of a culture of peace and democratic values.

CG02 - Students are able to solve problems and make decisions of any kind under the commitment to the defense and practice of equality policies.

CG03 - Students are able to work as a team both at multidisciplinary level and with their own peers respecting the principle of equality of men and women.



Asignatura: Fundamentos Matemáticos de la Mecánica Cuántica
Código: 32523
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

CROSS-COMPREHENSIVE SKILLS

CT01 - Students are able to adapt their selves to different cultural environments by demonstrating that they are able to respond to change with flexibility.

CT02 - Students are organized at work demonstrating that they know how to manage their time and resources.

SPECIFIC SKILLS

CE01- Students demonstrate their knowledge and understanding of the facts applying concepts, principles and theories related to the Theoretical Chemistry and Computational Modeling.

CE04 - Students understand the theoretical and practical bases of computational techniques with which they can analyze the electronic, morphological and structural structure of a compound and interpret the results adequately.

CE12 - Students are familiar with the fundamental postulates of Quantum Mechanics necessary for a good understanding of the most common methods used in quantum chemistry.

CE17 - Students understand and manage the mathematical tools required for the development of theoretical chemistry both in fundamental aspects and applications.

1.12. Contenidos del programa / Course contents

Fundamentos Matemáticos de la Mecánica Cuántica

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- Estados puros y estados mezcla
- 10- Postulados de la mecánica cuántica
- 11- Observables compatibles e incompatibles
- 12- Operadores de densidad
- 13- Imágenes de evolución temporal
- 14- Teoría de perturbaciones dependientes del tiempo
- 15- Sistemas compuestos. Correlación y entrelazamiento
- 16- Representaciones discretas. Cambios de base



Asignatura: Fundamentos Matemáticos de la Mecánica Cuántica
Código: 32523
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

- 17- Representaciones de posiciones y de momentos
- 18- Formalismo de segunda cuantización
- 19- Operadores y matrices de densidad reducidos. Espinorbitales naturales

Mathematical Foundations of Theoretical Chemistry

Part I

- 1 - Introduction. Solution of Schrödinger equation in simple systems
- 2 - Basic algebra
- 3 - Functional Spaces
- 4 - Approximate Methods in Quantum Chemistry: Variational Principle and Time-independent Perturbation Theory
- 5 - Independent and Identical Particles
- 6 - Angular momentum, spin.
- 7 - Main theorems in Quantum Mechanics
- 8 - Composition of Angular Momenta.

Part II

- 9- Pure states and mixed states
- 10- Postulates of Quantum Mechanics
- 11- Compatible and incompatible observables
- 12- Density operators
- 13- Time evolution pictures
- 14- Time dependent perturbation theory
- 15- Compound systems. Correlation and entanglement
- 16- Discrete representations. Basis changes
- 17- Position and momentum representations
- 18- Second quantization formalism
- 19- Reduced density operators and matrices. Natural spinorbitals

1.13. Referencias de consulta / Course bibliography

a) Nivel básico / Very basic level

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)



Asignatura: Fundamentos Matemáticos de la Mecánica Cuántica
Código: 32523
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

Donald A. McQuarrie
University Science Books

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

b) Nivel Recomendado / **Recommended level**

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 / **Advanced level**

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

Quantum Mechanics (2 Volumes in 1)
Albert Messiah

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

2. Métodos docentes / **Teaching methodology**

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

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



Asignatura: Fundamentos Matemáticos de la Mecánica Cuántica
 Código: 32523
 Centro: Facultad de Ciencias
 Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
 Nivel: Máster
 Tipo: Formación Obligatoria
 N° de créditos: 5 ECTS

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.

Lecture: The Professor will deliver lectures about the theoretical contents of the course during two-hour sessions. The presentations will be based on the different materials available at the Moodle platform.

Network teaching: All the tools available at the Moodle website (<https://posgrado.uam.es>) will be used (uploading of teaching materials, utilization of work team strategies, wiki, blogs, e-mail, etc.).

Online Seminars: After the lecturing period, online seminars between the Professor and the students will be arranged at the *virtual classroom* in order to discuss the results being obtained, the potential problems and difficulties in using the various methodologies as well as to supervise the preparation of the required reports.

Tutoring sessions: The professor can organize either individual or group tutoring sessions about particular topics and questions raised by students.

3. Tiempo de trabajo del estudiante / Student workload

Presencial:

Clases teóricas en aula / aula virtual31 horas
 Seminarios.....12 horas

No Presencial:

Estudio autónomo individual o en grupo.....32 horas
 Preparación de seminarios.....20 horas
 Elaboración de una memoria con ejercicios planteados en clase.....30 horas

TOTAL (5 ECTS * 25 horas/ECTS).....125 horas

Contact hours:

Theoretical lessons in classroom / virtual classroom31 hours
 Seminars.....12 hours

Independent study hours:

self-study or group study32 hours
 Preparation of seminars, assigned tasks and study.....20 hours



Asignatura: Fundamentos Matemáticos de la Mecánica Cuántica
Código: 32523
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

Elaboration of a memory based on the exercises proposed in class.....30 hours
TOTAL (5 ECTS * 25 hours/ECTS).....125 hours

4. Métodos de evaluación y porcentaje en la calificación final / Evaluation procedures and weight of components in the final grade

Convocatoria ordinaria

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

La nota final de la asignatura se basará en

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

Convocatoria extraordinaria

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

- 100% ejercicios

Ordinary assessment

The knowledge acquired by the student will be evaluated along the course. The educational model to follow will emphasize a continuous effort and advance in training and learning.

The final student mark will be based on exercises that must be done during the course. The next criteria will be followed for assessment of student exercises:

- 60% from a set of proposed exercises.
- 40% from the student reports, discussions between the student and professor in tutoring session and seminars.

Extraordinary assessment

The student will have to repeat those exercises not presented during the course and repeat those incorrectly done. The student will also do a final exam. The student mark will be obtained from:

- 100% from the student exercises presented and discussions between the student and the teachers.



Asignatura: Fundamentos Matemáticos de la Mecánica Cuántica
Código: 32523
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

5. Cronograma* / **Course calendar**

Por favor, comprobar el horario oficial publicado en la página web del Máster.
[Please, check the official schedule posted on the master website.](#)

*Este cronograma tiene carácter orientativo

[*This course calendar is orientative](#)



Asignatura: Sólidos
Código: 31248
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

1. ASIGNATURA / **COURSE TITLE**

Sólidos / [Solids](#)

1.1. Código / **Course number**

31248

1.2. Materia / **Content area**

Módulo 3. Optatividad / [Module 3. Optional courses](#)

1.3. Tipo / **Course type**

Optativa / [Elective subject](#)

1.4. Nivel / **Course level**

Máster / [Master](#)

1.5. Curso / **Year**

1º / [1st](#)

1.6. Semestre / **Semester**

Anual / [Anual](#)

1.7. Número de créditos / **Credit allotment**

5 créditos ECTS / [5 ECTS credits](#)

1.8. Requisitos previos / **Prerequisites**

No hay requisitos previos / [There are no previous prerequisites](#)

1.9. Requisitos mínimos de asistencia a las sesiones presenciales / **Minimum attendance requirement**

La asistencia a las clases es obligatoria / [Attendance is mandatory](#)



Asignatura: Sólidos
Código: 31248
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

1.10. Datos del equipo docente / Faculty data

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Antonio M. Márquez Cruz (Coordinador / **Coordinator**)
Departamento de Química Física / **Department of Physical Chemistry**
Universidad de Sevilla / **University of Sevilla**
Correo electrónico/**Email**: marquez@us.es
Página web/**Website**: <http://personal.us.es/marquez>
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: Contact by email

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Pablo García Fernández
Departamento de Ciencias de la Tierra y Física de la Materia Condensada/
Department of Earth Sciences and Physics of Condensed Matter
Universidad de Cantabria / **University of Cantabria**
Correo electrónico/**Email**: garciapa@unican.es
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: Contact by email

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Cristina Díaz Blanco
Departamento de Química / **Department of Chemistry**
Universidad Autónoma de Madrid
Correo electrónico/**Email**: cristina.diaz@uam.es
Página web/**Website**: <http://web.uam.es/departamentos/ciencias/quimica/cristina/>
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: Contact by email

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Julia Contreras García
Departamento de Química Teórica / **Department of theoretical chemistry**
Universidad Pierre et Marie Curie / **University Pierre et Marie Curie**
Correo electrónico/**Email**: julia.contreras.garcia@gmail.com
Página web/**Website**: <http://www.lct.jussieu.fr/pagesperso/contrera/>
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: Contact by email

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Coen de Graaf
Departamento de Química Física e Inorgánica / **Department of Physical and Inorganic Chemistry**
Universidad Rovira i Virgili / **Rovira and Virgili University (Tarragona, Spain)**
Correo electrónico/**Email**: coen.degraaf@urv.cat
Página web/**Website**: <https://www.icrea.cat/Web/ScientificStaff/coen-de-graaf-367>
<http://www.quimica.urv.es/~w3qf/>
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: Contact by email

1.11. Objetivos del curso / Course objectives

1.11a. Resultados del aprendizaje

Proporcionar al alumno la metodología básica para el tratamiento en sistemas condensados periódicos puros y con defectos de los siguientes aspectos: Cristalografía; Estructura electrónica; Termodinámica; Transiciones de fase;



Asignatura: Sólidos
Código: 31248
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

Superficies; Catálisis heterogénea; Propiedades ópticas en materia condensada; Magnetismo. En el curso los estudiantes recibirán una introducción intensiva a la modelización y tratamiento de estos problemas en el estado sólido.

1.11b. Competencias

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

BÁSICAS Y GENERALES

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

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

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

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

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

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

TRANSVERSALES

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

ESPECÍFICAS

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



Asignatura: Sólidos
Código: 31248
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

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

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

1.11a. Learning objectives

To provide to the students the basic methodology to treat pure and defective periodic systems of condensed matter dealing with the following topics: Crystallography; Electronic structure; Thermodynamics; Phase transitions; Surfaces; Heterogeneous catalysis; Optical properties in condensed matter; Magnetism. In the course the students will receive an intensive introduction to the modelization and treatment of all these issues in solids.

1.11b. Skills

These learning objectives contribute to provide the following skills for the students:

BASIC AND GENERAL SKILLS

CB6 - Students possess and understand knowledge that provides a basis or opportunity to be original in the development and/or application of ideas, often in a research context.

CB7 - Students know how to apply the acquired knowledge and their problem solving capacity in new or little known environments within broader (or multidisciplinary) contexts related to their area of study.

CB9 - Students know how to communicate their conclusions and the knowledge and reasons that support them to specialized and non-specialized audiences in a clear and unambiguous way.

CB10 - Students possess the learning skills that allow them to continue studying in a way that will be self-directed or autonomous.

CG01 - Students are able to foster, in academic and professional contexts, technological and scientific progress within a society based on knowledge and respect for: a) fundamental rights and equal opportunities between men and women, b) The principles of equal opportunities and universal accessibility for persons with disabilities, and c) the values of a culture of peace and democratic values.

CG04 - Students develop a critical thinking and reasoning and know how to communicate them in an egalitarian and non-sexist way both in oral and written form, in their own language and in a foreign language.



Asignatura: Sólidos
Código: 31248
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

CROSS-COMPREHENSIVE SKILLS

CT03 - Students have the ability of analyze and synthesize in such a way that they can understand, interpret and evaluate the relevant information by assuming with responsibility their own learning or, in the future, the identification of professional exits and employment fields.

SPECIFIC SKILLS

CE03 - Students acquire an overview of the different applications of the Theoretical Chemistry and modeling in the fields of Chemistry, Biochemistry, Materials Sciences, Astrophysics and Catalysis.

CE04 - Students understand the theoretical and practical bases of computational techniques with which they can analyze the electronic, morphological and structural structure of a compound and interpret the results adequately.

CE28 - Provide basic methodology for the treatment of periodic systems, crystals and polymers.

1.12. Contenidos del programa / Course contents

1. CRISTALOGRAFÍA

- 1.1 Simetría en cristales.
- 1.2 Espacio recíproco

2. ESTRUCTURA ELECTRÓNICA

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

3. TERMODINÁMICA

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

4. ENLACE QUÍMICO

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

5. CÁLCULOS AB INITIO DE ESTRUCTURA ELECTRÓNICA EN SÓLIDOS

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

6. PROPIEDADES TERMODINÁMICAS DE SÓLIDOS CRISTALINOS

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



Asignatura: Sólidos
Código: 31248
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

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

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

8. PROPIEDADES ÓPTICAS

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

9. ELEMENTOS DE MAGNETISMO MOLECULAR Y CRISTALINO

- 10.1 Hamiltonianos modelo y efectivos
- 10.2 Aplicaciones

1. CRYSTALLOGRAPHY

- 1.1 Symmetry in crystals
- 1.2 Reciprocal space

2. ELECTRONIC STRUCTURE

- 2.1 Cluster and periodic models
- 2.2 Computational methodologies

3. THERMODYNAMICS

- 3.1 Static approximation and thermal models
- 3.2 Phase transitions

4. CHEMICAL BONDING

- 4.1 Scalar field induced topologies in crystals
- 4.2 Characterization of chemical bonding in solids and relationship to macroscopic properties

5. AB INITIO ELECTRONIC STRUCTURE CALCULATIONS IN SOLIDS

- 5.1 Comparison of wave function and density functional methods
- 5.2 From crystallographic data basis to electronic structure calculations

6. THERMODYNAMIC PROPERTIES OF CRYSTALLINE SOLIDS

- 6.1 E(V) curves and the static model
- 6.2 Phonons in crystals

7. AB INITIO SIMULATIONS OF STRUCTURAL, THERMODYNAMIC PROPERTIES AND REACTIVITY IN SURFACES

- 8.1 Cluster and periodic models
- 8.3 Surface structure and reconstruction
- 8.2 Adsorption and reactivity in surfaces

8. OPTICAL PROPERTIES

- 8.1 Quantum chemistry and the macroscopic Maxwell equations



Asignatura: Sólidos
 Código: 31248
 Centro: Facultad de Ciencias
 Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
 Nivel: Máster
 Tipo: Formación Optativa
 Nº de créditos: 5 ECTS

8.2 Applications

9. ELEMENTS OF MOLECULAR AND CRYSTALLINE MAGNETISM

9.1 Model and effective hamiltonians

9.2 Applications

1.13. Referencias de consulta / Course bibliography

- [01] L. Kantorovich, "Quantum Theory of the Solid State" (Kluwer, Dordrecht, The Netherlands, 2004).
- [02] R. M. Martin, "Electronic Structure: Basic theory and practical methods" (Cambridge UP, Cambridge, UK, 2004).
- [03] E. Kaxiras, "Atomic and Electronic Structure of Solids" (Cambridge UP, Cambridge, UK, 2003).
- [04] O. Anderson, "Equations of State for Solids in Geophysics and Ceramic Science" (Oxford UP, Oxford, UK, 1995).
- [05] A. Otero-de-la-Roza and V. Luaña, "Equations of state and thermodynamics of solids using empirical corrections in the quasiharmonic approximation", Phys. Rev. B 84 (2011) 024109.
- [06] A. R. Oganov, Ed, "Modern methods of crystal structure prediction" (Wiley-VCH, 2011).
- [07] J. P. Poirier, "Introduction to the Physics of the Earth's Interior" (Cambridge UP, Cambridge, UK, 2000).
- [08] B. Bersuker, "The Jahn-Teller effect" (Cambridge UP, Cambridge, UK, 2006).
- [09] E. R. Johnson, S. Keinan, P. Mori-Sanchez, J. Contreras-Garcia, A. J. Cohen, and W. Yang, "Revealing Noncovalent Interactions", J. Am. Chem. Soc. 132 , 6498 (2010)
- [10] B. Silvi, A. Savin, "Classification of chemical bonds based on the topological analysis of electron localization functions", Nature 371, 683 (1994)
- [11] J. Contreras-Garcia, A. M. Pendas, B. Silvi, J. M. Recio, "Computation of local and global properties of the ELF topology in crystals", J. Theor. Chem. Comp. 113, 1068 (2009)
- [12] A. Otero-de-la-Roza, J. Contreras-Garcia, E. R. Johnson, "Revealing non-covalent interactions in solids, NCI plots revisited" Phys. Chem. Chem. Phys. 14, 12165 (2012)
- [13] P. García-Fernández, J. Wojdel, J. Iñiguez and J. Junquera "Second-principles method for materials simulations including electron and lattice degrees of freedom" Phys. Rev. B 93, 195137 (2016)
- [14] M. S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, A. Jorio "Group Theory: Applications to the Physics of Condensed Matter" (Springer, 2007)
- [15] J.L. Whitten and H. Yang, "Theory of Chemisorption and reactions on metal surfaces" Surf. Sci. rep. 24, 59 (1996)
- [16] A. R. Leach, "Molecular modeling" (Prentice Hall, 2001).
- [17] T. Schlick, "Molecular modeling and simulation" (Springer, 2002).



Asignatura: Sólidos
 Código: 31248
 Centro: Facultad de Ciencias
 Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
 Nivel: Máster
 Tipo: Formación Optativa
 Nº de créditos: 5 ECTS

- [18] D. Marx and J. Hutter, "Ab initio molecular dynamics: Theory and implementation", in "Modern methods and algorithms on quantum chemistry" by J. Grotendorst (Ed.), (John von Neumann Institute, NIC series vol. 1 \& 3, 2000).
- [19] C. Fiolhais, F. Nogueira and M. A. L. Marques, Eds. "A Primer in Density Functional Theory", (Springer, Heidelberg, 2003).
- [20] R. Dronskowski "Computational Chemistry of Solid State Materials" (Wiley-VCH, 2005).
- [21] P. Huang, and E. A. Carter, "Advances in Correlated Electronic Structure Methods for Solids, Surfaces and Nanostructures", Ann. Rev. Phys. Chem. 59 (2008) 261.
- [22] G. Pacchioni, A. M. Ferrari, A. M. Márquez, and F. Illas, "Importance of Madelung Potential in Quantum Chemical Modeling of Ionic Surfaces", J. Comput. Chem. 18 (1997) 617.
- [23] J. N. Norskov, F. Abild-Pedersen, F. Studt, and T. Bligaard "Density functional theory in surface chemistry and catalysis" PNAS 108 (2011) 937-943.
- [24] F. Yang, J. Graciani, J. Evans, P. Liu, J. Hrbek, J. Fernández. Sanz, and J. A. Rodríguez, "CO oxidation on inverse CeOx/Cu(111) Catalysts: High catalytic activity and ceria-promoted dissociation of O₂", J. Am. Chem. Soc. 133 (2011) 3444.
- [25] C. de Graaf, R. Broer, "Magnetic Interactions in Molecules and Solids" Second volume of the textbooks of the TCCM Master. (Springer 2015).
- [26] J. P. Malrieu, R. Caballol, C. J. Calzado, C. de Graaf, N. Guihéry "Magnetic Interactions in Molecules and Highly Correlated Materials: Physical Content, Analytical Derivation, and Rigorous Extraction of Magnetic Hamiltonians", Chemical Reviews 114, 429-492 (2014).

2. Métodos docentes / Teaching methodology

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

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

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

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



Asignatura: Sólidos
 Código: 31248
 Centro: Facultad de Ciencias
 Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
 Nivel: Máster
 Tipo: Formación Optativa
 Nº de créditos: 5 ECTS

Lecture: The Professor will deliver lectures about the theoretical contents of the course during two-hour sessions. The presentations will be based on the different materials available at the Moodle platform.

Network teaching: All the tools available at the Moodle website (<https://posgrado.uam.es>) will be used (uploading of teaching materials, utilization of work team strategies, wiki, blogs, e-mail, etc.).

Solving practical exercises: Numerical problems, multiple choice questions, interpretation and information processing, evaluation of scientific publications, etc..

Written reports: Orientation and supervision in the preparation of written reports.

3. Tiempo de trabajo del estudiante / Student workload

Presencial:

Clases teóricas en aula / aula virtual50 horas

No Presencial:

Estudio autónomo individual o en grupo.....45 horas

Elaboración de una memoria con ejercicios planteados en clase30 horas

TOTAL (5 ECTS * 25 horas/ECTS)125 horas

Contact hours:

Theoretical lessons in classroom / virtual classroom 50 hours

Independent study hours:

self-study or group study45 hours

Elaboration of a memory based on the exercises proposed in class30 hours

TOTAL (5 ECTS * 25 hours/ECTS) 125 hours

4. Métodos de evaluación y porcentaje en la calificación final / Evaluation procedures and weight of components in the final grade

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.



Asignatura: Sólidos
Código: 31248
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

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

- 60% Realización de un examen práctico sobre la teoría y las prácticas de la asignatura.
- 20% la discusión que sobre la misma se realice con el profesor en tutorías y seminarios.
- 20% la realización de un informe sobre un artículo científico.

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.

Ordinary assessment

The knowledge acquired by the student will be evaluated along the course. The educational model to follow will emphasize a continuous effort and advance in training and learning.

The final student mark will be based on exercises that must be done during the course. The next criteria will be followed for assessment of student exercises:

- 60% from a practical exam on the course contents and practical session,
- 20% from discussions between the student and professor in tutoring sessions and seminars.
- 20 % from writing an essay based on a scientific paper

Extraordinary assessment

The student will have to face a final exam, including both theory and practical exercises. The student mark will be obtained from:

- 70% from the final exam,
- 30% from the individual work.

5. Cronograma* / Course calendar

Por favor, comprobar el horario oficial publicado en la página web del Máster.
Please, check the official schedule posted on the master website.

*Este cronograma tiene carácter orientativo

*This course calendar is orientative



Asignatura: Mecánica Estadística y Aplicaciones en Simulación
Código: 32524
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5

1. ASIGNATURA / COURSE TITLE

Mecánica Estadística y aplicaciones en simulación /
[Statistical Mechanics and Applications on Simulations](#)

1.1. Código / Course number

32524

1.2. Materia / Content area

Módulo 1. Fundamentos / [Module 1. Fundamentals Course](#)

1.3. Tipo / Course type

Obligatoria / [Compulsory subject](#)

1.4. Nivel / Course level

Máster / [Master](#)

1.5. Curso / Year

1º / [1st](#)

1.6. Semestre / Semester

Anual / [Anual](#)

1.7. Número de créditos / Credit allotment

5 créditos ECTS / [5 ECTS credits](#)

1.8. Requisitos previos / Prerequisites

No hay requisitos previos / [There are no previous prerequisites](#)



Asignatura: Mecánica Estadística y Aplicaciones en Simulación
Código: 32524
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5

1.9. Requisitos mínimos de asistencia a las sesiones presenciales / **Minimum attendance requirement**

La asistencia a las clases es obligatoria / [Attendance is mandatory](#)

1.10. Datos del equipo docente / **Faculty data**

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Martín Navarro, María Elena (Coordinadora)
Departamento de Ingeniería Química y Química Física / [Department of Chemical engineering and Physical Chemistry](#)
Universidad de Extremadura / [University of Extremadura](#)
Teléfono / **Phone**: +34 924289300 Ext: 86125
Correo electrónico/**Email**: memartin@unex.es
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: contact by email

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Corchado Martín-Romo, José Carlos
Departamento de Ingeniería Química y Química Física / [Department of Chemical engineering and Physical Chemistry](#)
Universidad de Extremadura / [University of Extremadura](#)
Teléfono / **Phone**: 34 924289300 Ext: 89787
Correo electrónico/**Email**: corchado@unex.es
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: contact by email

Docente(s)/**Lecturer(s)**: Sayós, Ramón
Departamento de Ciencia de Materiales y Química Física / [Department of Materials Science and Chemical Physics](#)
Universidad de Barcelona / [University of Barcelona](#)
Correo electrónico/**Email**: r.sayos@ub.edu
Página web/**Website**: <http://www.ub.edu/rsogroup>
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: contact by email

1.11. Objetivos del curso / **Course objectives**

1.11a. Resultados del aprendizaje

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

En la parte correspondiente a la Mecánica Estadística se busca que los alumnos comprendan la base de la Mecánica Estadística formulada a partir de las colectividades. El alumno debe entender las características de los colectivos más importantes (microcanónico, canónico y grancanónico), y saber elegir el más conveniente según sea el sistema químico que se desee estudiar. También debe



Asignatura: Mecánica Estadística y Aplicaciones en Simulación
 Código: 32524
 Centro: Facultad de Ciencias
 Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
 Nivel: Máster
 Tipo: Formación Obligatoria
 N° de créditos: 5

entender las diferencias entre las estadísticas cuánticas de Fermi-Dirac y de Bose-Einstein, así como las situaciones en las que estas conducen al límite clásico. El alumno debe saber calcular funciones de partición y aplicar las estadísticas cuánticas y la clásica a los sistemas ideales de interés en Química. Tendrán que comprender las diferencias entre sistemas reales e ideales, analizando las características de gases reales y fases condensadas. Además se abordará el estudio mecano estadístico de sistemas de no equilibrio. Por último y dada la dificultad de encontrar resultados analíticos para muchos problemas, se analizarán los métodos de simulación con especial atención al método de MonteCarlo que permite obtener soluciones numéricas en sistemas y situaciones complejas.

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

1.11b. Competencias

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

BÁSICAS Y GENERALES

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

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

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

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



Asignatura: Mecánica Estadística y Aplicaciones en Simulación
Código: 32524
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5

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

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

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

TRANSVERSALES

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

ESPECÍFICAS

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

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

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

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

1.11a. Learning objectives

This course is organized in two parts. The first part is dedicated to the foundations of Statistical Mechanics and the second part is devoted to the simulation applications.

After completing the course, the students should understand the central ideas of Statistical Mechanics, formulated on the basis of statistical ensembles. They should understand the main features of the most important ensembles (microcanonical, canonical and grand canonical), and should be able to select the most appropriate ensemble depending on the chemical system that is under investigation. The student should also understand the differences between Fermi-Dirac and Bose-Einstein statistics, as well as the conditions upon which the quantum statistics converge to the classical limit. The student should know how to calculate partition functions and



Asignatura: Mecánica Estadística y Aplicaciones en Simulación
 Código: 32524
 Centro: Facultad de Ciencias
 Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
 Nivel: Máster
 Tipo: Formación Obligatoria
 N° de créditos: 5

apply quantum and classical statistics to ideal systems of interest in chemistry. The student should understand the differences between real and ideal systems, by analysing the main characteristics of real gases and condensed phases. Moreover, the statistical mechanics of non-equilibrium systems will be treated. Finally and due to the difficulty of finding analytical solutions, simulation methods such as MonteCarlo will be studied to obtain numerical solutions to complex problems.

As applications, students will calculate, making use of the information obtained from first principles through Quantum Chemistry calculation programs (e.g., GAMESS, GAUSSIAN,..) partition functions and enthalpic and entropic corrections to free energy differences in different situations of chemical interest (e.g., thermodynamic equilibrium constants of a gas phase reaction).

In addition, in other applications, different macroscopic properties will be determined by means of simulations with Molecular Dynamics or Monte Carlo methods, using the appropriate force fields to describe the molecular interactions (e.g., TraPPE, GROMOS,..). Examples of some of the applications to be carried out: 1) calculation of a liquid-vapor surface tension (e.g., ethanol), 2) calculation of a liquid-liquid interfacial tension (e.g., dodecane/water), 3) calculation of a diffusion coefficient in a gas mixture (e.g., N₂ and O₂ in air), 4) calculation of an adsorption isotherm for a gas/solid system (e.g., CO₂ on a zeolite).

1.11b. Skills

These learning objectives contribute to provide the following skills for the students:

BASIC AND GENERAL SKILLS

CB6 - Students possess and understand knowledge that provides a basis or opportunity to be original in the development and/or application of ideas, often in a research context.

CB7 - Students know how to apply the acquired knowledge and their problem solving capacity in new or little known environments within broader (or multidisciplinary) contexts related to their area of study.

CB8 - Students are able to integrate knowledge and face the complexity of making judgments from information that, incomplete or limited, includes reflections on social and ethical responsibilities linked to the application of their knowledge and judgments.

CB9 - Students know how to communicate their conclusions and the knowledge and reasons that support them to specialized and non-specialized audiences in a clear and unambiguous way.

CB10 - Students possess the learning skills that allow them to continue studying in a way that will be self-directed or autonomous.



Asignatura: Mecánica Estadística y Aplicaciones en Simulación
Código: 32524
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5

CG01 - Students are able to foster, in academic and professional contexts, technological and scientific progress within a society based on knowledge and respect for: a) fundamental rights and equal opportunities between men and women, b) The principles of equal opportunities and universal accessibility for persons with disabilities, and c) the values of a culture of peace and democratic values.

CG02 - Students are able to solve problems and make decisions of any kind under the commitment to the defense and practice of equality policies.

CROSS-COMPREHENSIVE SKILLS

CT01 - Students are able to adapt their selves to different cultural environments by demonstrating that they are able to respond to change with flexibility.

SPECIFIC SKILLS

CE01- Students demonstrate their knowledge and understanding of the facts applying concepts, principles and theories related to the Theoretical Chemistry and Computational Modeling.

CE04 - Students understand the theoretical and practical bases of computational techniques with which they can analyze the electronic, morphological and structural structure of a compound and interpret the results adequately.

CE09 - Students understand the basis of Statistical Mechanics formulated from the collectivities.

CE10 - Students know how to calculate partition functions and apply quantum and classical statistics to the ideal systems of interest in Chemistry.

1.12. Contenidos del programa / Course contents

1- Mecánica Estadística

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

2- Aplicaciones

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



Asignatura: Mecánica Estadística y Aplicaciones en Simulación
Código: 32524
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5

- Cálculo de una tensión interfacial líquido-líquido.
- Cálculo de una isoterma de adsorción tipo gas/sólido absorbente.

1- Statistical Mechanics

- Ensembles and postulates of statistical mechanics.
- Microcanonical, canonical and grand canonical ensembles.
- Fermi-Dirac, Bose-Einstein and Boltzmann statistics.
- Classical statistical mechanics. Applications to ideal systems: ideal gases, ideal gas of photons, phonons, electrons in metals.
- Systems of interacting particles: dilute real gases, second virial coefficient, van der Waals equation.
- Statistical mechanics of non-equilibrium systems.
- MonteCarlo simulations.

2- Applications

- Calculation of molecular partition functions and macroscopic properties for a gas-phase reaction (ΔU , ΔS , ΔG , K , ..) at various temperatures.
- Calculation of a liquid-vapor surface tension.
- Calculation of a liquid-liquid interfacial tension.

1.13. Referencias de consulta / Course bibliography

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

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

Hill, T. L., "An Introduction to Statistical Thermodynamics" (Dover, New York) 1986

McQuarrie, D. A., "Statistical Mechanics", (Harper and Row, New York) 1976

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

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

2. Métodos docentes / Teaching methodology

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



Asignatura: Mecánica Estadística y Aplicaciones en Simulación
 Código: 32524
 Centro: Facultad de Ciencias
 Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
 Nivel: Máster
 Tipo: Formación Obligatoria
 N° de créditos: 5

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

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

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

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

Lecture: The Professor will deliver face-to-face, or, online video lectures about the theoretical contents of the course during two-hour sessions. The presentations will be based on the different materials available at the Moodle platform.

Network teaching: All the tools available at the Moodle website (<https://posgrado.uam.es>) will be used (uploading of teaching materials, utilization of work team strategies, wiki, blogs, e-mail, etc.).

Seminars: After the lecturing period, seminars between the Professor and the students are scheduled in order to apply the theoretical content to problem solving and to analyze the potential problems and difficulties in using the various methodologies as well as to supervise the preparation of the required reports. .

Tutoring sessions: The professor can organize either individual or group tutoring sessions about particular topics and questions raised by students.

Computational laboratory. In several practical sessions the students will make calculations on different macroscopic properties of chemical interest, applying the theoretical knowledge of Statistical Mechanics previously explained. .

3. Tiempo de trabajo del estudiante / Student workload

Presencial:

Clases teóricas en aula / aula virtual25 horas
 Laboratorio computacional10 horas



Asignatura: Mecánica Estadística y Aplicaciones en Simulación
 Código: 32524
 Centro: Facultad de Ciencias
 Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
 Nivel: Máster
 Tipo: Formación Obligatoria
 N° de créditos: 5

No Presencial:

Estudio autónomo individual o en grupo.....40 horas
 Preparación de seminarios.....20 horas
 Elaboración de una memoria con ejercicios planteados en clase.....30 horas

TOTAL (5 ECTS * 25 horas/ECTS).....125 horas

Contact hours:

Theoretical lessons in classroom / virtual classroom25 hours
 Computational laboratory10 hours

Independent study hours:

self-study or group study40 hours
 Preparation of seminars, assigned tasks and study.....20 hours
 Elaboration of a memory based on the exercises proposed in class.....30 hours

TOTAL (5 ECTS * 25 hours/ECTS).....125 hours

4. Métodos de evaluación y porcentaje en la calificación final / Evaluation procedures and weight of components in the final grade

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 ejercicios relacionados con la asignatura,
- 40 % Finalización de una de las prácticas realizadas en clase y entrega de un informe crítico sobre la misma.

Convocatoria extraordinaria

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

- 70% Examen final,



Asignatura: Mecánica Estadística y Aplicaciones en Simulación
Código: 32524
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5

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

Ordinary assessment

The knowledge acquired by the student will be evaluated along the course. The educational model to follow will emphasize a continuous effort and advance in training and learning.

The final student mark will be based on exercises that must be done during the course. The next criteria will be followed for assessment of student exercises:

- 60% Realization of exercises related to the subject
- 40% Completion of one of the practical sessions carried out in class, and delivery of a critical report on it

Extraordinary assessment

The student will have to face a final exam, including both theory and practical exercises. The latter consists in an individual work that the student will have to do with the programs used during the course. The student mark will be obtained from:

- 70% from the final exam,
- 30% from the individual work.

5. Cronograma* / Course calendar

Por favor, comprobar el horario oficial publicado en la página web del Máster.
Please, check the official schedule posted on the master website.

*Este cronograma tiene carácter orientativo

*This course calendar is orientative



Asignatura: Simetría en átomos, moléculas y sólidos
Código: 32525
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

1. ASIGNATURA / COURSE TITLE

Simetría en átomos, moléculas y sólidos / [Symmetry in atoms, molecules and solids](#)

1.1. Código / Course number

32525

1.2. Materia / Content area

Módulo 1. Fundamentos / [Module 1. Fundamental Course](#)

1.3. Tipo / Course type

Obligatoria / [Compulsory subject](#)

1.4. Nivel / Course level

Máster / [Master](#)

1.5. Curso / Year

1º / [1st](#)

1.6. Semestre / Semester

2º / [2nd](#)

1.7. Número de créditos / Credit allotment

5 créditos ECTS / [5 ECTS credits](#)

1.8. Requisitos previos / Prerequisites

No hay requisitos previos / [There are no previous prerequisites](#)

1.9. Requisitos mínimos de asistencia a las sesiones presenciales / Minimum attendance requirement

La asistencia a las clases es obligatoria / [Attendance is mandatory](#)



Asignatura: Simetría en átomos, moléculas y sólidos
Código: 32525
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

1.10. Datos del equipo docente / Faculty data

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Pablo Garcia Fernandez (Coordinador/**Coordinator**)
Departamento de Ciencias de la Tierra y física de la materia condensada/
Department of Earth Sciences and Solid State Physics
Universidad de Cantabria / **University of Cantabria**
Teléfono / **Phone**: 942202069
Correo electrónico/**Email**: garciapa@unican.es
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: Contact by email

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Jesús Aldegunde
Departamento de / **Department of Chemical-Physics**
Universidad de / **University of Salamanca**
Despacho - Módulo / **Office - Module**:
Teléfono / **Phone**: +34 670547267
Correo electrónico/**Email**: jalde@usal.es
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: Contact by email

1.11. Objetivos del curso / Course objectives

1.11a. Resultados del aprendizaje

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

1.11b. Competencias

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

BÁSICAS Y GENERALES

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

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

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

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



Asignatura: Simetría en átomos, moléculas y sólidos
Código: 32525
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

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

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

TRANSVERSALES

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

ESPECÍFICAS

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

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

1.11a. Learning objectives

To provide the students with the mathematical background necessary to adequately treat the symmetry in atoms, molecules and solids with special emphasis in posible applications.

1.11b. Skills

These learning objectives contribute to provide the following skills for the students:

BASIC AND GENERAL SKILLS

CB6 - Students possess and understand knowledge that provides a basis or opportunity to be original in the development and/or application of ideas, often in a research context.

CB7 - Students know how to apply the acquired knowledge and their problem solving capacity in new or little known environments within broader (or multidisciplinary) contexts related to their area of study.

CB8 - Students are able to integrate knowledge and face the complexity of making judgments from information that, incomplete or limited, includes reflections on social and ethical responsibilities linked to the application of their knowledge and judgments.



Asignatura: Simetría en átomos, moléculas y sólidos
Código: 32525
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

CB9 - Students know how to communicate their conclusions and the knowledge and reasons that support them to specialized and non-specialized audiences in a clear and unambiguous way.

CB10 - Students possess the learning skills that allow them to continue studying in a way that will be self-directed or autonomous.

CG01 - Students are able to foster, in academic and professional contexts, technological and scientific progress within a society based on knowledge and respect for: a) fundamental rights and equal opportunities between men and women, b) The principles of equal opportunities and universal accessibility for persons with disabilities, and c) the values of a culture of peace and democratic values.

CROSS-COMPREHENSIVE SKILLS

CT01 - Students are able to adapt their selves to different cultural environments by demonstrating that they are able to respond to change with flexibility.

SPECIFIC SKILLS

CE11 - Students possess the necessary mathematical basis for the correct treatment of the symmetry in atoms, molecules and solids, with emphasis in the possible applications.

CE17 - Students understand and manage the mathematical tools required for the development of theoretical chemistry both in fundamental aspects and applications.

1.12. Contenidos del programa / Course contents

1. Teoría de Grupos y simetría

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

2. Simetría en moléculas

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

3. Simetría en Sólidos

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



Asignatura: Simetría en átomos, moléculas y sólidos
Código: 32525
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

1. Group theory and symmetry
 - Introduction to abstract group theory
 - Introduction to representation theory
 - Matrix representations of symmetry groups
 - Irreducible representations

2. Symmetry in molecules
 - Groups and representations in quantum mechanics
 - Application of group theory in quantum chemistry
 - Rotation group $SO(3)$

3. Symmetry in solids
 - Space-group symmetry
 - Isotropic and anisotropic structures
 - Reciprocal lattice of a Bravais lattice
 - Application to electronic wavefunctions

1.13. Referencias de consulta / Course bibliography

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

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

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

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

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

M. Tinkham. *Group Theory and Quantum Mechanics*. MacGraw Hill (New York) 1974

Dove, *Structure and Dynamics*. Oxford University Press (Oxford) 2003

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

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

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

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



Asignatura: Simetría en átomos, moléculas y sólidos
 Código: 32525
 Centro: Facultad de Ciencias
 Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
 Nivel: Máster
 Tipo: Formación Obligatoria
 N° de créditos: 5 ECTS

2. Métodos docentes / Teaching methodology

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

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

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

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

Lecture: The Professor will deliver lectures about the theoretical contents of the course during two-hour sessions. The presentations will be based on the different materials available at the Moodle platform.

Network teaching: All the tools available at the Moodle website (<https://posgrado.uam.es>) will be used (uploading of teaching materials, utilization of work team strategies, wiki, blogs, e-mail, etc.).

Tutoring sessions: The professor can organize either individual or group tutoring sessions about particular topics and questions raised by students.

Online Seminars: After the lecturing period, online seminars between the Professor and the students will be arranged at the *virtual classroom* in order to discuss the results being obtained, the potential problems and difficulties in using the various methodologies as well as to supervise the preparation of the required reports.

3. Tiempo de trabajo del estudiante / Student workload

Presencial:

Clases teóricas en aula / aula virtual.....20 horas
 Seminarios.....20 horas

No Presencial:

Estudio autónomo individual o en grupo.....35 horas



Asignatura: Simetría en átomos, moléculas y sólidos
 Código: 32525
 Centro: Facultad de Ciencias
 Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
 Nivel: Máster
 Tipo: Formación Obligatoria
 N° de créditos: 5 ECTS

Preparación de seminarios.....20 horas
 Elaboración de una memoria con ejercicios planteados en clase.....30 horas
 TOTAL (5 ECTS * 25 horas/ECTS).....125 horas

Contact hours:

Theoretical lessons in classroom / virtual classroom20 hours
 Seminar.....20 hours

Independent study hours:

self-study or group study35 hours
 Preparation of seminars, assigned tasks and study.....20 hours
 Elaboration of a memory based on the exercises proposed in class.....30 hours
 TOTAL (5 ECTS * 25 hours/ECTS).....125 hours

4. Métodos de evaluación y porcentaje en la calificación final / Evaluation procedures and weight of components in the final grade

Convocatoria ordinaria

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

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

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

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:



Asignatura: Simetría en átomos, moléculas y sólidos
Código: 32525
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

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

Ordinary assessment

The knowledge acquired by the student will be evaluated along the course. The educational model to follow will emphasize a continuous effort and advance in training and learning.

The final student mark will be based on exercises that must be done during the course and tests carried out mid-semester and at the end of the course. The next criteria will be followed for assessment of student exercises:

- 50 % Symmetry in atoms and molecules
 - Resolution of problems that will be specified throughout the course. The problems will be of mixed nature, involving both practical and theoretical aspects.
- 50 % Symmetry in solids
 - 30% solution of 2 standard problems associated to the theory provided before the intensive course and to be handed out during the intensive course.
 - 20% solution of an advanced exercise using computational resources, both a program to calculate band structures and the Bilbao crystallographic server

Extraordinary assessment

The student will have to face a final exam, including both theory and practical exercises. The student mark will be obtained from:

- 70% from the final exam,
- 30% from the individual work.

5. Cronograma* / Course calendar

Por favor, comprobar el horario oficial publicado en la página web del Máster.
Please, check the official schedule posted on the master website.

*Este cronograma tiene carácter orientativo

*This course calendar is orientative



Asignatura: Métodos de la Química Teórica I
Código: 32527
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación bligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

1. ASIGNATURA / **COURSE TITLE**

Métodos de la Química Teórica I / [Theoretical Chemistry Methods I](#)

1.1. Código / **Course number**

32527

1.2. Materia / **Content area**

Módulo 2. Métodos / [Module 2. Methods](#)

1.3. Tipo / **Course type**

Obligatoria / [Compulsory subject](#)

1.4. Nivel / **Course level**

Máster / [Master](#)

1.5. Curso / **Year**

1º / [1st](#)

1.6. Semestre / **Semester**

2º / [2nd](#)

1.7. Número de créditos / **Credit allotment**

5 créditos ECTS / [5 ECTS credits](#)

1.8. Requisitos previos / **Prerequisites**

No hay requisitos previos / [There are no previous prerequisites](#)

1.9. Requisitos mínimos de asistencia a las sesiones presenciales / **Minimum attendance requirement**

La asistencia a las clases es obligatoria / [Attendance is mandatory](#)



Asignatura: Métodos de la Química Teórica I
Código: 32527
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación bligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

1.10. Datos del equipo docente / Faculty data

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Alfredo Sánchez (Coordinador / **Coordinator**)
Departamento de / **Department of Physical Chemistry**
Universidad de / **University of Valencia**
Teléfono / **Phone**: 963 544 712
Correo electrónico/**Email**: sanchez@uv.es
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: 10:00-14:00

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Victor Rayón
Departamento de Química/ **Department of Chemistry**
Universidad de Valladolid / **University of Valladolid**
Teléfono / **Phone**: 983184017
Correo electrónico/**Email**: victormanuel.rayon@uva.es
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: 10:00-14:00

1.11. Objetivos del curso / Course objectives

1.11a. Resultados del aprendizaje

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

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

1.11b. Competencias

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

BÁSICAS Y GENERALES

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

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



Asignatura: Métodos de la Química Teórica I
Código: 32527
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

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

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

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

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

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

TRANSVERSALES

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

ESPECÍFICAS

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

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

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

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



Asignatura: Métodos de la Química Teórica I
Código: 32527
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación bligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

1.11a. Learning objectives

As a result of participating in this course, students will be able to:

- Understand the theoretical and practical bases of computational techniques used in the electronic, structural and morphological analysis of a compound and interpret the results adequately.
- Understand the basic principles of "ab initio" methods, and Density Functional Theory.
- Shed light on what method is the most appropriate for each problem, considering the differences between them.
- Demonstrate knowledge and comprehension of the facts, applying concepts, principles and theories associated with Theoretical Chemistry and Computational Modelling.

1.11b. Skills

These learning objectives contribute to provide the following skills for the students:

BASIC AND GENERAL SKILLS

CB6 - Students possess and understand knowledge that provides a basis or opportunity to be original in the development and/or application of ideas, often in a research context.

CB7 - Students know how to apply the acquired knowledge and their problem solving capacity in new or little known environments within broader (or multidisciplinary) contexts related to their area of study.

CB8 - Students are able to integrate knowledge and face the complexity of making judgments from information that, incomplete or limited, includes reflections on social and ethical responsibilities linked to the application of their knowledge and judgments.

CB9 - Students know how to communicate their conclusions and the knowledge and reasons that support them to specialized and non-specialized audiences in a clear and unambiguous way.

CB10 - Students possess the learning skills that allow them to continue studying in a way that will be self-directed or autonomous.

CG01 - Students are able to foster, in academic and professional contexts, technological and scientific progress within a society based on knowledge and respect for: a) fundamental rights and equal opportunities between men and women, b) The principles of equal opportunities and universal accessibility for persons with disabilities, and c) the values of a culture of peace and democratic values.

CG02 - Students are able to solve problems and make decisions of any kind under the commitment to the defense and practice of equality policies.



Asignatura: Métodos de la Química Teórica I
Código: 32527
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

CROSS-COMPREHENSIVE SKILLS

CT01 - Students are able to adapt their selves to different cultural environments by demonstrating that they are able to respond to change with flexibility.

SPECIFIC SKILLS

CE01- Students demonstrate their knowledge and understanding of the facts applying concepts, principles and theories related to the Theoretical Chemistry and Computational Modeling.

CE04 - Students understand the theoretical and practical bases of computational techniques with which they can analyze the electronic, morphological and structural structure of a compound and interpret the results adequately.

CE15 - Students understand the basic principles of "ab initio" methodologies and Density Functional Theory.

CE16 - Students are able to discern between the different existing methods and know how to select the most appropriate method for each problem.

1.12. Contenidos del programa / Course contents

1. Métodos Ab initio:

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

2. Teoría del Funcional de la Densidad:

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

En la parte de Métodos de la Química Cuántica se cubre 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 y comprenda cómo se desarrollan los principales tipos de funcionales de intercambio-correlación y sus características. El alumno debe ser capaz de discernir entre los diferentes métodos existentes cómo seleccionar el más adecuado para cada problema.



Asignatura: Métodos de la Química Teórica I
Código: 32527
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación bligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

1. Ab initio Methods:

- Hartree-Fock methods: RHF y UHF
- Basis functions, pseudopotentials and effective potential.
- Variational wavefunction-based Electron Correlation Methods: Configuration Interaction and multiconfigurational methods
- Moller-Plesset Perturbation Theory
- Introduction to Coupled Cluster methods

2. Density Functional Theory:

- Preliminary concepts. Hohenberg-Kohn Theorems.
- Kohn-Sham Method.
- Density Functional Approximations (DFAs; approximations to exchange-correlation functionals)

In the part of Quantum Chemical Methods we will formulate the main theorems in which the different methodologies are based and the most important "ab initio" methods will be studied. In the Functional Density Theory section the students should understand the basic ideas in which the theory is based. The student should understand how the different correlation-exchange functionals are developed and their main features. The student should know how to select the most adequate method for a fixed problem.

1.13. Referencias de consulta / Course bibliography

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



Asignatura: Métodos de la Química Teórica I
 Código: 32527
 Centro: Facultad de Ciencias
 Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
 Nivel: Máster
 Tipo: Formación obligatoria
 Nº de créditos: 5 ECTS

2. Métodos docentes / Teaching methodology

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

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

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

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

Lecture: The Professor will deliver face-to-face, or, online video lectures about the theoretical contents of the course during two-hour sessions. The presentations will be based on the different materials available at the Moodle platform.

Network teaching: All the tools available at the Moodle website (<http://www.uam.es/moodle>) will be used (uploading of teaching materials, utilization of work team strategies, wiki, blogs, e-mail, etc.).

Tutoring sessions: The professor can organize either individual or group tutoring sessions about particular topics and questions raised by students.

Online Seminars: After the lecturing period, online seminars between the Professor and the students will be arranged at the *virtual classroom* in order to discuss the results being obtained, the potential problems and difficulties in using the various methodologies as well as to supervise the preparation of the required reports.

3. Tiempo de trabajo del estudiante / Student workload

Presencial:

Clases teóricas en aula / aula virtual.....20 horas
 Seminarios.....15 horas

No Presencial:

Estudio autónomo individual o en grupo.....40 horas



Asignatura: Métodos de la Química Teórica I
 Código: 32527
 Centro: Facultad de Ciencias
 Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
 Nivel: Máster
 Tipo: Formación bligatoria
 N° de créditos: 5 ECTS

Preparación de seminarios.....20 horas
 Elaboración de una memoria con ejercicios planteados en clase.....30 horas
 TOTAL (5 ECTS * 25 horas/ECTS).....125 horas

Contact hours:

Theoretical lessons in classroom / virtual classroom20 hours
 Seminar.....15 hours

Independent study hours:

self-study or group study40 hours
 Preparation of seminars, assigned tasks and study.....20 hours
 Elaboration of a memory based on the exercises proposed in class.....30 hours
 TOTAL (5 ECTS * 25 hours/ECTS).....125 hours

4. Métodos de evaluación y porcentaje en la calificación final / Evaluation procedures and weight of components in the final grade

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.



Asignatura: Métodos de la Química Teórica I
Código: 32527
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación bligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

Ordinary assessment

The knowledge acquired by the student will be evaluated along the course. The educational model to follow will emphasize a continuous effort and advance in training and learning.

The final student mark will be based on exercises that must be done during the course. The next criteria will be followed for assessment of student exercises:

- 70% from the student report,
- 30% from discussions between the student and professor in tutoring sessions and seminars.

Extraordinary assessment

The student will have to face a final exam, including both theory and practical exercises. The student mark will be obtained from:

- 70% from the final exam,
- 30% from the individual work.

5. Cronograma* / Course calendar

Por favor, comprobar el horario oficial publicado en la página web del Máster.
Please, check the official schedule posted on the master website.

*Este cronograma tiene carácter orientativo

*This course calendar is orientative



Asignatura: Métodos de la Química Teórica II
Código: 32528
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Master en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

1. ASIGNATURA / COURSE TITLE

Métodos de la Química Teórica II / [Theoretical Chemistry Methods II](#)

1.1. Código / Course number

32528

1.2. Materia / Content area

Módulo 2. Métodos / [Module 2. Methods](#)

1.3. Tipo / Course type

Obligatoria / [Compulsory subject](#)

1.4. Nivel / Course level

Máster / [Master](#)

1.5. Curso / Year

1º / [1st](#)

1.6. Semestre / Semester

2º / [2nd](#)

1.7. Número de créditos / Credit allotment

5 créditos ECTS / [5 ECTS credits](#)

1.8. Requisitos previos / Prerequisites

No hay requisitos previos / [There are no previous prerequisites](#)

1.9. Requisitos mínimos de asistencia a las sesiones presenciales / Minimum attendance requirement

La asistencia a las clases es obligatoria / [Attendance is mandatory](#)



Asignatura: Métodos de la Química Teórica II
Código: 32528
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Master en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

1.10. Datos del equipo docente / Faculty data

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Vicent Moliner (coordinador / [coordinator](#))
Departamento de Química Física y Analítica / [Department of Physical Chemistry and Analytical Chemistry](#)
Universitat Jaume I / [Jaume I University](#)
Teléfono / **Phone**: 964728084
Correo electrónico/**Email**: moliner@uji.es
Página web/**Website**: <http://www.biocomp.uji.es>
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: Contact by email

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Iñaki Tuñón
Departamento de Química Física / [Department of Physical Chemistry](#)
Universidad de Valencia / [University of Valencia](#)
Teléfono / **Phone**: 963544332
Correo electrónico/**Email**: ignacio.tunon@uv.es
Página web/**Website**: <http://www.uv.es/tunon/>
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: Contact by email

1.11. Objetivos del curso / Course objectives

1.11a. Resultados del aprendizaje

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

- 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?



Asignatura: Métodos de la Química Teórica II
Código: 32528
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Master en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

- ¿Cómo obtener propiedades promedio y de equilibrio en sistemas con muchas configuraciones accesibles?
- ¿Cómo se pueden calcular propiedades dependientes del tiempo?

1.11b. Competencias

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

BÁSICAS Y GENERALES

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

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

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

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

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

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

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

TRANSVERSALES

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



Asignatura: Métodos de la Química Teórica II
Código: 32528
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Master en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

ESPECÍFICAS

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

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

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

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

1.11a. Learning objectives

This is the second course of the Master devoted to methods of Theoretical and Computational Chemistry. In this case the focus is on methods for the study of large molecular systems with a large number of accessible conformations. Therefore, the course focuses on three main objectives:

- Calculation of the energy for large systems: force fields, and methods based on continuum models and methods based on the use of hybrid QM / MM potentials
- Exploring the configurational space: Methods of classical and quantum molecular dynamics
- Obtaining dynamic properties through molecular dynamics simulations

More specifically, the specific objectives of the course in the form of questions are:

- How can we describe large molecular systems such as proteins or nucleic acids?
- How to describe large molecular systems when a subset of atoms has to be described by quantum mechanics.
- How to describe intermolecular interactions in large systems.
- How to describe molecules in solution.
- Which are the advantages/disadvantages of continuum models?
- How to get average and equilibrium properties in systems with many configurations available.
- How can we calculate time-dependent properties.

1.11b. Skills

These learning objectives contribute to provide the following skills for the students:

BASIC AND GENERAL SKILLS

CB6 - Students possess and understand knowledge that provides a basis or opportunity to be original in the development and/or application of ideas, often in a research context.



Asignatura: Métodos de la Química Teórica II
Código: 32528
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Master en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

CB7 - Students know how to apply the acquired knowledge and their problem solving capacity in new or little known environments within broader (or multidisciplinary) contexts related to their area of study.

CB8 - Students are able to integrate knowledge and face the complexity of making judgments from information that, incomplete or limited, includes reflections on social and ethical responsibilities linked to the application of their knowledge and judgments.

CB9 - Students know how to communicate their conclusions and the knowledge and reasons that support them to specialized and non-specialized audiences in a clear and unambiguous way.

CB10 - Students possess the learning skills that allow them to continue studying in a way that will be self-directed or autonomous.

CG01 - Students are able to foster, in academic and professional contexts, technological and scientific progress within a society based on knowledge and respect for: a) fundamental rights and equal opportunities between men and women, b) The principles of equal opportunities and universal accessibility for persons with disabilities, and c) the values of a culture of peace and democratic values.

CG02 - Students are able to solve problems and make decisions of any kind under the commitment to the defense and practice of equality policies.

CROSS-COMPREHENSIVE SKILLS

CT01 - Students are able to adapt their selves to different cultural environments by demonstrating that they are able to respond to change with flexibility.

SPECIFIC SKILLS

CE01- Students demonstrate their knowledge and understanding of the facts applying concepts, principles and theories related to the Theoretical Chemistry and Computational Modeling.

CE04 - Students understand the theoretical and practical bases of computational techniques with which they can analyze the electronic, morphological and structural structure of a compound and interpret the results adequately.

CE12 - Students are familiar with the fundamental postulates of Quantum Mechanics necessary for a good understanding of the most common methods used in quantum chemistry.

CE16 - Students are able to discern between the different existing methods and know how to select the most appropriate method for each problem.



Asignatura: Métodos de la Química Teórica II
Código: 32528
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Master en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

1.12. Contenidos del programa / **Course contents**

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

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

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

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

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

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

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

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

Prácticas

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

Práctica 2. Simulación de Dinámica Molecular de disoluciones acuosas

Práctica 3. Simulación de Dinámica Molecular de una proteína

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



Asignatura: Métodos de la Química Teórica II
Código: 32528
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Master en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

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

Práctica 6. Cálculo de efectos cinéticos isotópicos

Unit 1. Intermolecular interactions. Introduction. Long range interactions. Repulsive interactions. Total interactions: models and limitations

Unit 2. Force Fields. Introduction. Energy terms. Parametrization and force fields. Practical questions: validation

Unit 3. Simulation methods. Introduction. Definition of the system. Molecular Dynamics. Practical questions.

Unit 4. Molecular Geometry and Energy. Potential energy surface (PES). Exploration and characterization of stationary points. Molecular properties. Conformational space of biological molecules

Unit 5. Solvation Models applied to Quantum Mechanics. Discrete Models. Continuum Models. Mixed discrete-continuum Models. Hybrid QM/MM Models. Applications

Unit 6. Free Energy Calculations. Introduction. Normal Modes Analysis method. Thermodynamic properties and averaged geometries. Helmholtz and Gibbs Free Energies. Free Energies and Partition Functions. Free Energies as Ensemble Averages. The Particle Insertion Method. Free Energy Perturbation. Thermodynamic Integration. Slow Growth. Umbrella Sampling. Problems and Errors

Unit 7. Advanced Simulation methods: Introduction. Ab Initio Molecular Dynamics. Car-Parrinello Molecular Dynamics

Unit 8. Advanced Free Energy methods: physical path-based methods: nudged elastic band, dimer method, string method, growing string method, transition path sampling, Parallel Tempering and Replica Exchange MD. History-dependent biasing potential methods: Metadynamics (MTD) and Paradynamics (PD).

Laboratory:

Practical lesson 1. Calculation of force field terms using quantum mechanics

Practical lesson 2. Molecular Dynamics of aqueous solutions

Practical lesson 3. Molecular dynamics of proteins

Practical lesson 4. Reactivity: obtaining the reaction profile in gas phase.

Practical lesson 5. Reactivity: obtaining the reaction profile in solution.

Practical lesson 6. Kinetic isotope effects (KIE).



Asignatura: Métodos de la Química Teórica II
Código: 32528
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Master en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

1.13. Referencias de consulta / Course bibliography

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

2. Métodos docentes / Teaching methodology

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

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

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

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

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

Lecture: The Professor will deliver face-to-face, or, online video lectures about the theoretical contents of the course during two-hour sessions. The presentations will be based on the different materials available at the Moodle platform.



Asignatura: Métodos de la Química Teórica II
 Código: 32528
 Centro: Facultad de Ciencias
 Titulación: Master en Química Teórica y Modelización Computacional
 Nivel: Máster
 Tipo: Formación Obligatoria
 N° de créditos: 5 ECTS

Practical sessions: Teacher will propose exercises based in theoretical concepts seen in lectures to perform calculations with computational programs.

Network teaching: All the tools available at the Moodle website (<https://posgrado.uam.es>) will be used (uploading of teaching materials, utilization of work team strategies, wiki, blogs, e-mail, etc.).

Tutoring sessions: The professor can organize either individual or group tutoring sessions about particular topics and questions raised by students.

Online Seminars: After the lecturing period, online seminars between the Professor and the students will be arranged at the *virtual classroom* in order to discuss the results being obtained, the potential problems and difficulties in using the various methodologies as well as to supervise the preparation of the required reports.

3. Tiempo de trabajo del estudiante / Student workload

Presencial:

Clases teóricas en aula / aula virtual 20 horas
 Clases prácticas/seminarios..... 15 horas

No Presencial:

Estudio autónomo individual o en grupo..... 40 horas
 Preparación de seminarios..... 20 horas
 Elaboración de una memoria con ejercicios planteados en clase..... 30 horas

TOTAL (5 ECTS * 25 horas/ECTS)..... 125 horas

Contact hours:

Theoretical lessons in classroom / virtual classroom 20 hours
 Practical lessons/seminars..... 15 hours

Independent study hours:

self-study or group study 40 hours
 Preparation of seminars, assigned tasks and study..... 20 hours
 Elaboration of a memory based on the exercises proposed in class.... 30 hours

TOTAL (5 ECTS * 25 hours/ECTS)..... 125 hours



Asignatura: Métodos de la Química Teórica II
Código: 32528
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Master en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

4. Métodos de evaluación y porcentaje en la calificación final / Evaluation procedures and weight of components in the final grade

Convocatoria ordinaria

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

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

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.

Ordinary assessment

The knowledge acquired by the student will be evaluated along the course. The educational model to follow will emphasize a continuous effort and advance in training and learning.

The final student mark will be based on exercises that must be done during the course and the discussion of them. These exercises will be based in the contents of practical lessons of the course.

Extraordinary assessment

The student will have to face a final exam, including both theory and practical exercises. The student mark will be obtained from:

- 70% from the final exam,
- 30% from the individual work.

5. Cronograma* / Course calendar

Por favor, comprobar el horario oficial publicado en la página web del Máster.
Please, check the official schedule posted on the master website.

*Este cronograma tiene carácter orientativo

*This course calendar is orientative