



Asignatura: Técnicas Computacionales Avanzadas  
Código: 31236  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 6 ECTS

## 1. ASIGNATURA / COURSE TITLE

Técnicas Computacionales Avanzadas / [Advanced Computational Techniques](#)

### 1.1. Código / Course number

31236

### 1.2. Materia / Content area

Módulo 4. Aspectos avanzados / [Module 4. Advanced aspects](#)

### 1.3. Tipo / Course type

Obligatoria / [Compulsory subject](#)

### 1.4. Nivel / Course level

Máster / [Master](#)

### 1.5. Curso / Year

2º / [2<sup>nd</sup>](#)

### 1.6. Semestre / Semester

1º / [1<sup>st</sup>](#)

### 1.7. Número de créditos / Credit allotment

6 créditos ECTS / [6 ECTS credits](#)

### 1.8. Requisitos previos / Prerequisites

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



Asignatura: Técnicas Computacionales Avanzadas  
Código: 31236  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 6 ECTS

## 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 / [Lecturer](#): Giovanni Granucci  
Universidad de Pisa / [University of Pisa](#)

Docente / [Lecturer](#): Filippo De Angelis  
Institute of Molecular Science and Technologies (ISTM-CNR)

Docente / [Lecturer](#): Edoardo Mosconi  
Institute of Molecular Science and Technologies (ISTM-CNR)

Docente / [Lecturer](#): Stefano Evangelisti  
Universidad Toulouse III Paul Sabatier / [University Toulouse III Paul Sabatier](#)

Docente / [Lecturer](#): Dimitrios Skouteris  
Scuola Normale Superiore

Docente / [Lecturer](#): Stefano Pasqua  
Università degli studi di Perugia/ [University of Perugia](#)

Docente / [Lecturer](#): Alessandro Moriconi  
Università degli studi di Perugia/ [University of Perugia](#)

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

### 1.11a. Resultados del aprendizaje

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



Asignatura: Técnicas Computacionales Avanzadas

Código: 31236

Centro: Facultad de Ciencias

Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional

Nivel: Máster

Tipo: Formación Obligatoria

Nº de créditos: 6 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.

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

#### **TRANSVERSALES**

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

#### **ESPECÍFICAS**

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



Asignatura: Técnicas Computacionales Avanzadas

Código: 31236

Centro: Facultad de Ciencias

Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional

Nivel: Máster

Tipo: Formación Obligatoria

Nº de créditos: 6 ECTS

### 1.11a. Learning objectives

- Either set up or recognize the Schrödinger equation for model systems in the presence of external conditions so that their resolution can be planned using computational media.

- To know how to use network-based High Performance Computation (HPC) facilities such as Grid or similar techniques.

- To know about some library of parallel computing routines and how to apply them to some kind of particular problems (e.g., magnetic systems)

### 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.

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: Técnicas Computacionales Avanzadas  
Código: 31236  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 6 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

CE22 - Students know the existence of advanced computational techniques such as instruction and data channeling, superscalar and multiscalar processors, chain operations, parallel platforms, etc.

## 1.12. Contenidos del programa / Course contents

-- Aprender sobre el método Hartree (MCTDH) para resolver problemas dinámicos cuánticos dependientes del tiempo

-- Centrarse en las transiciones entre diferentes estados electrónicos que ocurren sin absorción o emisión de fotones ("transiciones sin radiación")

-- Aprender a procesar la realización de Objetos de Aprendizaje Digitales

-- To learn about the multi-configurational time-dependent Hartree (MCTDH) method for resolving time-dependent quantum dynamics problems

--- To focus on the transitions between different electronic states that occur without absorption or emission of photons ("radiationless transitions")

-- To learn to process of realization of Digital Learning Objects

## 1.13. Referencias de consulta / Course bibliography

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

The consultation material for all the subjects will be informed in advance on the website of the Intensive Course.

## 2. Métodos docentes / Teaching methodology

**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,



Asignatura: Técnicas Computacionales Avanzadas  
 Código: 31236  
 Centro: Facultad de Ciencias  
 Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
 Nivel: Máster  
 Tipo: Formación Obligatoria  
 N° de créditos: 6 ECTS

y una parte práctica, en la que el estudiante aprenderá a través de la resolución de casos prácticos.

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

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

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

**Classes in computer science classroom:** Teaching will be taught in a computer classroom. The classes, in two-hour sessions, will include a brief theoretical introduction, in which the teacher will explain the basic concepts and practical applications, and a practical part, in which the student will learn through the resolution of practical cases.

**Seminars:** The Professor and the students will 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 teóricas..... 32 horas  
 Tutorías..... 10 horas

#### No Presencial:

Estudio autónomo individual o en grupo..... 50 horas  
 Preparación de seminarios..... 23 horas  
 Elaboración de una memoria sobre resultados experimentales..... 35 horas

TOTAL (6 ECTS \* 25 horas/ECTS)..... 150 horas



Asignatura: Técnicas Computacionales Avanzadas  
Código: 31236  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 6 ECTS

**Contact hours:**

Theoretical lessons..... 32 hours  
Tutoring sessions..... 10 hours

**Independent study hours:**

self-study or group study ..... 50 hours  
Preparation of seminars, assigned tasks and study..... 23 hours  
Elaboration of a memory based on experimental results..... 35 hours  
TOTAL (6 ECTS \* 25 hours/ECTS)..... 150 hours

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

La nota final de la asignatura se basará en

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

The next criteria will be followed for assessment of student exercises:

- 60% Elaboration of a memory based on the exercises proposed in class.
- 40% Discussions between the student and professor in tutoring sessions and seminars about the exercises proposed in class.

#### 5. Cronograma / Course calendar

La edición número 13 del Curso Intensivo del Máster en Química Teórica y Modelización Computacional tendrá lugar en la Università degli Studi di Perugia (Italia) del 3 al 28 de septiembre de 2018.

Información del curso, conferencias y horario en:  
<http://www.chm.unipg.it/chimgen/mb/theo2//TCCM2018/EM-TCCM2018/EM-TCCM/Welcome.html>

The 13<sup>th</sup> edition of the Intensive Course of the Master in Theoretical Chemistry and Computational Modelling will be organized at the Università degli Studi di Perugia (Italy) from 3<sup>rd</sup> to 28<sup>th</sup> September 2018.

Curso 2018-2019



Asignatura: Técnicas Computacionales Avanzadas

Código: 31236

Centro: Facultad de Ciencias

Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional

Nivel: Máster

Tipo: Formación Obligatoria

Nº de créditos: 6 ECTS

Further information of the Intensive Course, lectures, schedule on:

<http://www.chm.unipg.it/chimgen/mb/theo2//TCCM2018/EM-TCCM2018/EM-TCCM/Welcome.html>





Asignatura: Teoría Avanzada de la Estructura Electrónica y la de la Materia Condensada  
Código: 31235  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 9 ECTS

## 1. ASIGNATURA / COURSE TITLE

Teoría Avanzada de la Estructura Electrónica y de la Materia Condensada / [Advanced Electronic Structure and Condensed Matter Theory](#)

### 1.1. Código / Course number

31235

### 1.2. Materia / Content area

Módulo 4. Aspectos avanzados / [Module 4. Advanced aspects](#)

### 1.3. Tipo / Course type

Obligatoria / [Compulsory subject](#)

### 1.4. Nivel / Course level

Máster / [Master](#)

### 1.5. Curso / Year

2º / [2<sup>nd</sup>](#)

### 1.6. Semestre / Semester

1º / [1<sup>st</sup>](#)

### 1.7. Número de créditos / Credit allotment

9 créditos ECTS / [9 ECTS credits](#)

### 1.8. Requisitos previos / Prerequisites

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



Asignatura: Teoría Avanzada de la Estructura Electrónica y la de la Materia Condensada  
Código: 31235  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 9 ECTS

## 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\(s\)](#): Marzio Rosi  
Universidad de Perugia / [University of Perugia](#)

Docente(s) / [Lecturer\(s\)](#): Coen de Graaf  
Universidad de Groninga / [University of Groningen](#)

Docente(s) / [Lecturer\(s\)](#): Remco Havenith  
Universidad de Groninga / [University of Groningen](#)

Docente(s) / [Lecturer\(s\)](#): Jaime Suarez  
Universidad de Milán / [University of Milan](#)

Docente(s) / [Lecturer\(s\)](#): Alfredo Sánchez  
Universidad de Valencia / [University of Valencia](#)

Docente(s) / [Lecturer\(s\)](#): Inmaculada Cuesta  
Universidad de Valencia / [University of Valencia](#)

Docente(s) / [Lecturer\(s\)](#): Leonardo Belpassi  
Institute of Molecular Science and Technologies (ISTM-CNR)

Docente(s) / [Lecturer\(s\)](#): Ivan Carnimeo  
International School for Advanced Studies

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

### 1.11a. Resultados del aprendizaje

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

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

-- Cálculo, utilizando métodos DFT, de propiedades moleculares de sistemas grandes, tanto para moléculas como para materiales



Asignatura: Teoría Avanzada de la Estructura Electrónica y la de la Materia Condensada  
Código: 31235  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 9 ECTS

-- Obtener una descripción teórica de la estructura electrónica que se puede utilizar para interpretar datos experimentales, predecir fenómenos interesantes y / o desarrollar nuevos conceptos teóricos

-- Introducir la teoría de Valence Bond (VB)

-- Aprender a interpretar los resultados de diferentes cálculos de Valence Bond utilizando diferentes modelos orbitales

-- Aprender herramientas teóricas y computacionales para resolver la Dinámica Molecular Cuántica en Espectroscopía Vibracional Nuclear

#### 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: Teoría Avanzada de la Estructura Electrónica y la de la Materia Condensada  
Código: 31235  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 9 ECTS

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

#### TRANSVERSALES

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

#### ESPECÍFICAS

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

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

#### 1.11a. Learning objectives

-- To familiarize the students with the possibilities that coupled cluster offers for the computation of a variety of molecular properties, which essentially represent the answer of the molecular system to an electromagnetic perturbation

-- To learn the theoretical basis of the methods, providing insights about the plane wave-pseudo potential method and Fast Fourier Transform techniques.

-- To calculate, using DFT methods, of molecular properties of large systems, both for molecules and materials

--To obtain a theoretical description of the electronic structure that can be used to interpret experimental data, predict interesting phenomena and/or develop new theoretical concepts

-- To introduce to Valence Bond (VB) theory

-- To learn how to interpret the results of different Valence Bond calculations using different orbital models

-- To learn theoretical and computational tools for solving the Quantum Molecular Dynamics in Nuclear Vibrational Spectroscopy



Asignatura: Teoría Avanzada de la Estructura Electrónica y la de la Materia Condensada  
Código: 31235  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 9 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.

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.

#### **SPECIFIC SKILLS**

CE20 - Students know and critically evaluate the applicability of advanced methods of quantum chemistry to quasi-generated systems, such as systems with transition metals or excited states (their spectroscopy and reactivity).

CE21 - Students know the theories and calculation methods for the study of solids and surfaces. Critical evaluation of its applicability to problems of catalysis, magnetism, conductivity, etc.



Asignatura: Teoría Avanzada de la Estructura Electrónica y la de la Materia Condensada  
Código: 31235  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 9 ECTS

## 1.12. Contenidos del programa / **Course contents**

- Introducción a la química computacional: teoría funcional de densidad para optimizaciones de geometría y enfoque de clúster acoplado para energías.
- Teoría avanzada de la estructura electrónica relacionada con los métodos post Hartree-Fock Estados electrónicos emocionados.
- Introducción a Valence Bond Theory.
- Dinámica cuántica para la espectroscopía vibracional nuclear
- Determinación de propiedades moleculares en el enfoque de clúster acoplado
- Química cuántica relativista
- Modelado de sistemas moleculares grandes con conjuntos de bases de ondas planas
  
- Introduction to computational chemistry: density functional theory for geometry optimizations and coupled cluster approach for energies.
- Advanced electron structure theory related with the post Hartree-Fock methods Electronic Excited States.
- Introduction to Valence Bond Theory.
- Quantum dynamics for Nuclear Vibrational Spectroscopy.
- Determination of molecular properties in the coupled cluster approach.
- Relativistic quantum chemistry.
- Modelling large molecular systems with plane waves basis sets.

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

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



Asignatura: Teoría Avanzada de la Estructura Electrónica y la de la Materia Condensada  
 Código: 31235  
 Centro: Facultad de Ciencias  
 Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
 Nivel: Máster  
 Tipo: Formación Obligatoria  
 N° de créditos: 9 ECTS

## 2. Métodos docentes / Teaching methodology

**Lección magistral:** El profesor expondrá los contenidos del curso en sesiones presenciales.

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

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

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

**Lecture:** The Professor will deliver lectures about the theoretical contents of the course.

**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:** The Professor and the students will 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.....	56 horas
Seminarios.....	8 horas

### No Presencial:

Estudio autónomo individual o en grupo.....	65 horas
Preparación de seminarios.....	36 horas
Elaboración de una memoria con ejercicios planteados en clase.....	60 horas

TOTAL (9 ECTS * 25 horas/ECTS).....	225 horas
-------------------------------------	-----------



Asignatura: Teoría Avanzada de la Estructura Electrónica y la de la Materia Condensada  
Código: 31235  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 9 ECTS

**Contact hours:**

Theoretical lessons in classroom..... 56 hours  
Seminars..... 8 hours

**Independent study hours:**

self-study or group study ..... 65 hours  
Preparation of seminars, assigned tasks and study..... 36 hours  
Elaboration of a memory based on the exercises proposed in class..... 60 hours

TOTAL (9 ECTS \* 25 hours/ECTS)..... 225 hours

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

La nota final de la asignatura se basará en

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

The next criteria will be followed for assessment of student exercises:

- 60% Elaboration of a memory based on the exercises proposed in class.
- 40% Discussions between the student and professor in tutoring sessions and seminars about the exercises proposed in class.

#### 5. Cronograma / Course calendar

La edición número 13 del Curso Intensivo del Máster en Química Teórica y Modelización Computacional tendrá lugar en la Università degli Studi di Perugia (Italia) del 3 al 28 de septiembre de 2018.

Información del curso, conferencias y horario en:  
<http://www.chm.unipg.it/chimgen/mb/theo2//TCCM2018/EM-TCCM2018/EM-TCCM/Welcome.html>

The 13<sup>th</sup> edition of the Intensive Course of the Master in Theoretical Chemistry and Computational Modelling will be organized at the Università degli Studi di Perugia (Italy) from 3<sup>rd</sup> to 28<sup>th</sup> September 2018.



Curso 2018-2019



Asignatura: Teoría Avanzada de la Estructura Electrónica y la de la  
Materia Condensada  
Código: 31235  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 9 ECTS

Further information of the Intensive Course, lectures, schedule on:

<http://www.chm.unipg.it/chimgen/mb/theo2//TCCM2018/EM-TCCM2018/EM-TCCM/Welcome.html>



Asignatura: Aplicaciones  
Código: 31238  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 6 ECTS

## 1. ASIGNATURA / **COURSE TITLE**

Aplicaciones / [Applications](#)

### 1.1. Código / **Course number**

31238

### 1.2. Materia / **Content area**

Módulo 5. Modelización avanzada y aplicaciones / [Module 5. Advanced modelling and applications](#)

### 1.3. Tipo / **Course type**

Obligatoria / [Compulsory subject](#)

### 1.4. Nivel / **Course level**

Máster / [Master](#)

### 1.5. Curso / **Year**

2º / [2<sup>nd</sup>](#)

### 1.6. Semestre / **Semester**

1º / [1<sup>st</sup>](#)

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

6 créditos ECTS / [6 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: Aplicaciones  
Código: 31238  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 6 ECTS

## 1.10. Datos del equipo docente / Faculty data

Docente(s) / [Lecturer\(s\)](#): Osvaldo Gervasi  
Universidad de Perugia / [University of Perugia](#)

Docente(s) / [Lecturer\(s\)](#): Jefferson Maul  
Universidad de Turín / [University of Turin](#)

Docente(s) / [Lecturer\(s\)](#): Alessandro Erba  
Universidad de Turín / [University of Turin](#)

Docente(s) / [Lecturer\(s\)](#): Mauro Stener  
Universitat de Trieste / [University of Trieste](#)

Docente(s) / [Lecturer\(s\)](#): Manuel Yáñez  
Universidad Autónoma de Madrid / [Autonomous University of Madrid](#)

Docente(s) / [Lecturer\(s\)](#): Albert Rimola  
Universidad Autónoma de Barcelona / [Autonomous University of Barcelona](#)

Docente(s) / [Lecturer\(s\)](#): Antonio Laganà  
Master-up srl

Docente(s) / [Lecturer\(s\)](#): Cecilia Ceccarelli  
Institut de Planétologie et d'Astrophysique de Grenoble

## 1.11. Objetivos del curso / Course objectives

### 1.11a. Resultados del aprendizaje

- Introducir algunos conceptos básicos relacionados con el modelado cuántico-mecánico de sólidos dentro de las llamadas condiciones de frontera periódica
- Proporcionar una visión general amplia de las principales propiedades de los materiales que pueden ser efectivamente calculados con algoritmos de última generación dentro de la teoría del funcional de la densidad (DFT)
- Conocer algunos conceptos básicos de la cristalografía se recordará para introducir redes directas y recíprocas. La necesidad de condiciones de frontera periódicas para simplificar el problema y el teorema de Bloch
- Para calcular el espectro de fotoabsorción de una serie de moléculas y clústeres metálicos
- Analizar diferentes métodos (basados en el análisis de la densidad de electrones), llevados a cabo en la función de distribución de densidad electrónica estrechamente



Asignatura: Aplicaciones  
Código: 31238  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 6 ECTS

relacionada con el cuadrado de la función de onda, para obtener información sobre las propiedades del sistema, a través del análisis de la función de onda

-- Reconocer y practicar cómo es la financiación de la investigación

-- Para una visión general de la química interdisciplinaria "fuera de la tierra" (medio interestelar)

### 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.

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: Aplicaciones  
Código: 31238  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 6 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.

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.

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.

#### 1.11a. Learning objectives

-- To introduce some basic concepts related to the quantum-mechanical modelling of solids within so-called periodic-boundary conditions

-- To provide a broad overview of the main properties of materials that can be effectively computed with state-of-the-art algorithms within the density functional theory (DFT)

--- To know some basic concepts of crystallography will be recalled to introduce direct and reciprocal lattices. The need for periodic-boundary conditions to simplify the problem and the Bloch theorem

--To calculate the photoabsorption spectrum of a series of molecules and metal clusters.

-- To analyze different methods (based on the analysis of the electron density), carried out on the electron density distribution function closely related to the square of the wavefunction, to get information about the properties of the system, through the analysis of the wavefunction

- Recognize and practice how research funding and a job.

--To overview the interdisciplinary chemistry “outside the earth” (interstellar medium)



Asignatura: Aplicaciones  
Código: 31238  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 6 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.

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.

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



Asignatura: Aplicaciones  
Código: 31238  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 6 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.

## 1.12. Contenidos del programa / Course contents

- Tendencias y desafíos modernos en computación de alto rendimiento
- Aproximación mecánica cuántica a la ciencia de los materiales. El código CRYSTAL en el trabajo
- Formalismo y aplicaciones de la teoría funcional de la densidad
- Funciones de onda y análisis vinculante
- Modelado de superficie, adsorción y reactividad.
- HABILIDADES DE COMUNICACIÓN - Mirando hacia el futuro: financiación de la investigación, empleo y emprendimiento
- NUEVAS TENDENCIAS EN CIENCIA - El desafío de la química en el medio interestelar
  
- Modern Trends and Challenges in High-performance/high-throughput Computing.
- Quantum Mechanical approach to Materials Science. The CRYSTAL code at work.
- Density Functional Theory Formalism and Applications.
- Wavefunctions and binding analysis.
  
- Surface Modelling, Adsorption and Reactivity.
  
- COMMUNICATION SKILLS - Looking ahead: research funding, jobs and entrepreneurship
  
- NEW TRENDS IN SCIENCE - The challenging rich chemistry in the interstellar medium



Asignatura: Aplicaciones  
Código: 31238  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 6 ECTS

### 1.13. Referencias de consulta / Course bibliography

1. R. F. W. Bader, *Atoms in Molecules. A Quantum Theory*, Clarendon Press, Oxford, 1990.
2. A. D. Becke and K. E. Edgecombe, *J. Chem. Phys.*, 1990, 92, 5397-5403.
3. A. Savin, R. Nesper, S. Wengert and T. F. Fäsler, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.*, 1997, 36, 1808-1832.
4. B. Silvi and A. Savin, *Nature*, 1994, 371, 683-686.
5. A. E. Reed, L. A. Curtiss and F. Weinhold, *Chem. Rev.*, 1988, 88, 899-926.
6. M. Alcamí, O. Mó and M. Yáñez, in *Molecular Electrostatic Potentials: Concepts and Applications*, ed. J. S. Murray and K. Sen, Elsevier, Amsterdam, 1996, vol. 3, pp. 407-456.
7. M. D. Sicilia, O. Mo, M. Yanez, J. C. Guillemin, J. F. Gal and P. C. Maria, *Eur. J. Mass Spectrom.*, 2003, 9, 245-255.
8. E. R. Johnson, S. Keinan, P. Mori-Sánchez, J. Contreras-García, A. J. Cohen, W. Yang, *J. Am. Chem. Soc.* 2010, 132(18), 6498-6506.

## 2. Métodos docentes / Teaching methodology

**Lección magistral:** El profesor expondrá los contenidos del curso en sesiones presenciales.

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

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

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





Asignatura: Aplicaciones  
 Código: 31238  
 Centro: Facultad de Ciencias  
 Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
 Nivel: Máster  
 Tipo: Formación Obligatoria  
 N° de créditos: 6 ECTS

**Lecture:** The Professor will deliver lectures about the theoretical contents of the course.

**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:** The Professor and the students will 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..... 32 horas  
 Seminarios..... 10 horas

#### No Presencial:

Estudio autónomo individual o en grupo..... 44 horas  
 Preparación de seminarios..... 24 horas  
 Elaboración de una memoria con ejercicios planteados en clase.....40 horas

TOTAL (6 ECTS \* 25 horas/ECTS).....150 horas

#### Contact hours:

Theoretical lessons..... 32 hours  
 Seminars..... 10 hours

#### Independent study hours:

Self-study or group study ..... 44 hours  
 Preparation of seminars, assigned tasks and study..... 24 hours  
 Elaboration of a memory based on the exercises proposed in class..... 40 hours

TOTAL (6 ECTS \* 25 hours/ECTS)..... 150 hours



Asignatura: Aplicaciones  
Código: 31238  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 6 ECTS

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

La nota final de la asignatura se basará en

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

The next criteria will be followed for assessment of student exercises:

- 60% Elaboration of a memory based on the exercises proposed in class.
- 40% Discussions between the student and professor in tutoring sessions and seminars about the exercises proposed in class.

#### 5. Cronograma / Course calendar

La edición número 13 del Curso Intensivo del Máster en Química Teórica y Modelización Computacional tendrá lugar en la Università degli Studi di Perugia (Italia) del 3 al 28 de septiembre de 2018.

Información del curso, conferencias y horario en:

<http://www.chm.unipg.it/chimgen/mb/theo2//TCCM2018/EM-TCCM2018/EM-TCCM/Welcome.html>

The 13<sup>th</sup> edition of the Intensive Course of the Master in Theoretical Chemistry and Computational Modelling will be organized at the Università degli Studi di Perugia (Italy) from 3<sup>rd</sup> to 28<sup>th</sup> September 2018.

Further information of the Intensive Course, lectures, schedule on:

<http://www.chm.unipg.it/chimgen/mb/theo2//TCCM2018/EM-TCCM2018/EM-TCCM/Welcome.html>



Asignatura: Dinámica Química y Molecular y Simulación y Modelización por Ordenador  
Código: 31237  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 9 ECTS

## 1. ASIGNATURA / COURSE TITLE

Dinámica Química y Molecular y Simulación y Modelización por Ordenador / [Chemistry and Molecular Dynamics - Simulation and Modelling](#)

### 1.1. Código / Course number

31237

### 1.2. Materia / Content area

Módulo 5. Modelización avanzada y aplicaciones / [Module 5. Advanced modelling and applications](#)

### 1.3. Tipo / Course type

Obligatoria / [Compulsory subject](#)

### 1.4. Nivel / Course level

Máster / [Master](#)

### 1.5. Curso / Year

2º / [2<sup>nd</sup>](#)

### 1.6. Semestre / Semester

1º / [1<sup>st</sup>](#)

### 1.7. Número de créditos / Credit allotment

9 créditos ECTS / [9 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 Química y Molecular y Simulación y Modelización por Ordenador  
Código: 31237  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 9 ECTS

## 1.10. Datos del equipo docente / Faculty data

Docente(s) / [Lecturer\(s\)](#): Cecilia Colletti  
Universidad de Chieti / [University of Chieti](#)

Docente(s) / [Lecturer\(s\)](#): José M. Hermida  
Universidad de Vigo / [University of Vigo](#)

Docente(s) / [Lecturer\(s\)](#): György Lendvay  
[Hungarian Academic of Sciences](#)

Docente(s) / [Lecturer\(s\)](#): Pedro A. Enríquez  
Universidad de La Rioja / [University of La Rioja](#)

Docente(s) / [Lecturer\(s\)](#): Fermin Huarte  
Universidad de Barcelona / [University of Barcelona](#)

Docente(s) / [Lecturer\(s\)](#): Manuel Lara  
Universidad Autónoma de Madrid / [Autonomous University of Madrid](#)

## 1.11. Objetivos del curso / Course objectives

### 1.11a. Resultados del aprendizaje

- Esbozar los principios básicos del enfoque del paquete de ondas dependiente del tiempo, que se ejemplificará a través de la simulación de propagaciones simples de paquetes de ondas en una dimensión
- Conocer los fundamentos de la Dinámica Molecular clásica y los pasos para preparar los cálculos MD
- Enfoque de paquete de onda dependiente del tiempo: obtención de información de dispersión
- Visión general de las teorías de las velocidades de reacción: las propiedades básicas de las reacciones elementales obtenidas a partir de experimentos de cinética de reacción
- El método de la trayectoria cuasiclásica (principios y aplicaciones)
- Descripción teórica de la transferencia colisional de energía

### 1.11b. Competencias

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



Asignatura: Dinámica Química y Molecular y Simulación y Modelización por Ordenador  
Código: 31237  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 9 ECTS

### **BÁSICAS Y GENERALES**

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

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

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

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

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

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

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

### **TRANSVERSALES**

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

### **ESPECÍFICAS**

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

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



Asignatura: Dinámica Química y Molecular y Simulación y Modelización por Ordenador  
Código: 31237  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 9 ECTS

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

### 1.11a. Learning objectives

- To outline the basics of the time-dependent wave-packet approach, that will be exemplified through the simulation of simple wave-packet propagations in one dimension.
- To know the fundamentals of classical Molecular Dynamics and the steps to prepare MD calculations.
- Time-dependent wavepacket approach: obtaining scattering information
- To overview of the theories of reaction rates: The basic properties of elementary reactions as obtained from reaction kinetics experiments
- The quasiclassical trajectory method( Principles and Applications)
- Theoretical description of collisional energy transfer

### 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: Dinámica Química y Molecular y Simulación y Modelización por Ordenador  
Código: 31237  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 9 ECTS

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.

#### **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.

CE18 - Students know theories and methods of calculation associated with kinetic processes and evaluate its applicability to the calculation of speed constants.

CE19 - Student are familiar with computational techniques which, based on mechanics and molecular dynamics, are the basis for designing molecules of interest in fields such as pharmacology, petrochemistry, etc.

## **1.12. Contenidos del programa / Course contents**

Mixed quantum-classical methods in collisional dynamics.

Intermolecular Forces, explicit solvent models and QM/MM statistical calculations.

Reaction Rate Theory.

The QCT method. From principles and to applications in Reaction Dynamics.

Molecular Dynamics: Fundamentals and Gas Physisorption Simulations.

Time-dependent wavepacket approach: obtaining scattering information.

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

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



Asignatura: Dinámica Química y Molecular y Simulación y Modelización por Ordenador  
 Código: 31237  
 Centro: Facultad de Ciencias  
 Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
 Nivel: Máster  
 Tipo: Formación Obligatoria  
 N° de créditos: 9 ECTS

‘Elements of Molecular Dynamics’, by W. Smith 2014

## 2. Métodos docentes / Teaching methodology

**Lección magistral:** El profesor expondrá los contenidos del curso en sesiones presenciales.

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

**Seminarios.** En ellos se discutirán los resultados obtenidos en los trabajos propuestos, las dudas sobre las metodologías empleadas, y se supervisará la preparación de los informes elaborados por los estudiantes.

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

**Lecture:** The Professor will deliver lectures about the theoretical contents of the course.

**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:** The Professor and the students will 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.....56 horas  
 Seminarios.....7 horas

### No Presencial:

Estudio autónomo individual o en grupo.....66 horas  
 Preparación de seminarios.....36 horas  
 Elaboración de una memoria con ejercicios planteados en clase.....60 horas





Asignatura: Dinámica Química y Molecular y Simulación y Modelización por Ordenador  
Código: 31237  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 9 ECTS

TOTAL (9 ECTS \* 25 horas/ECTS).....225 horas

**Contact hours:**

Theoretical lessons in classroom.....56 hours  
Seminars.....7 hours

**Independent study hours:**

self-study or group study .....66 hours  
Preparation of seminars, assigned tasks and study.....36 hours  
Elaboration of a memory based on the exercises proposed in class.....60 hours

TOTAL (9 ECTS \* 25 hours/ECTS).....225 horas

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

La nota final de la asignatura se basará en

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

The next criteria will be followed for assessment of student exercises:

- 60% Elaboration of a memory based on the exercises proposed in class.
- 40% Discussions between the student and professor in tutoring sessions and seminars about the exercises proposed in class.

#### 5. Cronograma / Course calendar

La edición número 13 del Curso Intensivo del Máster en Química Teórica y Modelización Computacional tendrá lugar en la Università degli Studi di Perugia (Italia) del 3 al 28 de septiembre de 2018.

Información del curso, conferencias y horario en:  
<http://www.chm.unipg.it/chimgen/mb/theo2//TCCM2018/EM-TCCM2018/EM-TCCM/Welcome.html>

The 13<sup>th</sup> edition of the Intensive Course of the Master in Theoretical Chemistry and Computational Modelling will be organized at the Università degli Studi di Perugia (Italy) from 3<sup>rd</sup> to 28<sup>th</sup> September 2018.

Curso 2018-2019



Asignatura: Dinámica Química y Molecular y Simulación y Modelización por Ordenador  
Código: 31237  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 9 ECTS

Further information of the Intensive Course, lectures, schedule on:

<http://www.chm.unipg.it/chimgen/mb/theo2//TCCM2018/EM-TCCM2018/EM-TCCM/Welcome.html>



Asignatura: Trabajo fin de Máster  
Código: 31239  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 30 ECTS

## 1. ASIGNATURA / COURSE TITLE

Trabajo fin de Máster / [Master Thesis](#)

### 1.1. Código / Course number

31239

### 1.2. Materia / Content area

Módulo 6. Trabajo de Máster / [Module 6. Master Thesis](#)

### 1.3. Tipo / Course type

Obligatoria / [Compulsory subject](#)

### 1.4. Nivel / Course level

Máster / [Master](#)

### 1.5. Curso / Year

2º / [2<sup>nd</sup>](#)

### 1.6. Semestre / Semester

2º / [2<sup>nd</sup>](#)

### 1.7. Número de créditos / Credit allotment

30 créditos ECTS / [30 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: Trabajo fin de Máster  
Código: 31239  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 30 ECTS

## 1.10. Datos del equipo docente / Faculty data

El director de Trabajo de Fin de Máster del alumno.

[The tutor assigned to the student.](#)

## 1.11. Objetivos del curso / Course objectives

Competencias

### BÁSICAS Y GENERALES

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

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

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

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

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

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

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

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



Asignatura: Trabajo fin de Máster  
Código: 31239  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 30 ECTS

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

#### **TRANSVERSALES**

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

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

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

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

#### **ESPECÍFICAS**

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

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

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

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

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

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



Asignatura: Trabajo fin de Máster  
Código: 31239  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 30 ECTS

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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



Asignatura: Trabajo fin de Máster  
Código: 31239  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 30 ECTS

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

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

CE23 - Los estudiantes tienen conocimientos tanto a nivel de usuario como de administrador de sistemas complejos de cálculo basados en UNIX/Linux. Esto incluye las operaciones cotidianas, seguridad, y también programación de Shell scripts para automatizar tareas con el objetivo de mantener un sistema de cálculo de complejidad media operativo con alta disponibilidad.

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

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

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

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

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

## Skills

### 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: Trabajo fin de Máster  
Código: 31239  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 30 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.

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.

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.

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.

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.

CE02 - Students broaden and/or acquire knowledge of the basic methods of Quantum Chemistry and evaluate its applicability in a critical way.





Asignatura: Trabajo fin de Máster  
Código: 31239  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 30 ECTS

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.

CE06 - Students are able to make a contribution through an original research that extends the frontiers of knowledge in Chemical simulation, developing a substantial corpus that deserves, at least in part, the publication referenced at national level.

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.

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.

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.

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.

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.

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

CE18 - Students know theories and methods of calculation associated with kinetic processes and evaluate its applicability to the calculation of speed constants.



Asignatura: Trabajo fin de Máster  
Código: 31239  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 30 ECTS

CE19 - Student are familiar with computational techniques which, based on mechanics and molecular dynamics, are the basis for designing molecules of interest in fields such as pharmacology, petrochemistry, etc.

CE20 - Students know and critically evaluate the applicability of advanced methods of quantum chemistry to quasi-generated systems, such as systems with transition metals or excited states (their spectroscopy and reactivity).

CE21 - Students know the theories and calculation methods for the study of solids and surfaces. Critical evaluation of its applicability to problems of catalysis, magnetism, conductivity, etc.

CE22 - Students know the existence of advanced computational techniques such as instruction and data channeling, superscalar and multiscalar processors, chain operations, parallel platforms, etc.

Specific skills from CE23 to CE28 are related to the optional courses module as follows:

CE23 - Students have both user-level and administrator-level knowledge of complex UNIX / Linux based computing systems. This includes day-to-day operations, security, and also scheduling Shell scripts to automate tasks with the goal of maintaining an operating system complexity calculation system with high availability.

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.

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

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.

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.

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

## 1.12. Contenidos del programa / Course contents

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



Asignatura: Trabajo fin de Máster  
Código: 31239  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 30 ECTS

Design, planning and development of an original research project.

### 1.13. Referencias de consulta / Course bibliography

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

Lectures suggested by tutor.

## 2. Métodos docentes / Teaching methodology

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

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

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

Seguimiento del Trabajo de Fin de Máster.

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

Seminars. The Professor and the students will 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.

Oral presentations of pre-prepared topics, including discussions with other students and professors.

Guidance and supervision in the preparation of reports.

Monitoring Master Thesis.

Active participation in tasks that allow the development of communication skills.

## 3. Tiempo de trabajo del estudiante / Student workload

### Presencial:

Estancia en una universidad externa.....	230 horas
Tutorías.....	20 horas
Seminarios.....	46 horas
Exposición pública de trabajos.....	4 horas



Asignatura: Trabajo fin de Máster  
Código: 31239  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 30 ECTS

**No Presencial:**

Estudio autónomo individual o en grupo.....380 horas  
Búsqueda bibliográfica y análisis de trabajos..... 10 horas  
Elaboración de una memoria con resultados del TFM..... 60 horas

TOTAL (30 ECTS \* 25 horas/ECTS)..... 750 horas

**Contact hours:**

Stay in a foreign university ..... 230 hours  
Tutoring sessions..... 20 hours  
Seminars..... 46 hours  
Public presentation of works..... 4 hours

**Independent study hours:**

Self-study or group study..... 380 hours  
Bibliography search and analysis work..... 10 hours  
Elaboration of a memory based on Master Thesis results..... 60 hours

TOTAL (30 ECTS \* 25 hours/ECTS)..... 750 hours

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

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

100% Making of a written report about an original research work done by the student and public and oral defence of it before a court evaluator.