

Guía académica

Máster Universitario en:

Máster Europeo

en Química Teórica

y Modelización Computacional



VNiVERSiDAD
D SALAMANCA

CAMPUS DE EXCELENCIA INTERNACIONAL

guías académicas 2013-2014

Edita:
SECRETARÍA GENERAL
UNIVERSIDAD DE SALAMANCA

Realizado por: IBEROPRINTER, S.L.L.
SALAMANCA 2013

PROPUESTA DE MASTER EUROPEO EN
"Theoretical Chemistry and Computational Modelling/
QUÍMICA TEÓRICA Y MODELIZACIÓN COMPUTACIONAL"

1. DATOS GENERALES

1.1 Título del Programa Oficial de Posgrado:

Máster Europeo en "Química Teórica y Modelización Computacional (Theoretical Chemistry and Computational Modelling)". Código MO2006-00459.

1.2 Órgano responsable de su desarrollo:

Este Máster está coordinado a nivel europeo por el Departamento de Química de la Universidad Autónoma de Madrid.

En la Universidad de Salamanca el Departamento responsable sería el de Química Física.

2. CARACTERÍSTICAS GENERALES DEL PROGRAMA

Este Máster Europeo está funcionando ya de manera efectiva en distintas Universidades españolas y europeas. Se han desarrollado tres ediciones (impartiéndose sus cursos intensivos de segundo año en las Universidades de Perugia, Autónoma de Madrid y Toulouse, respectivamente). Ha sido aprobado por el Ministerio con el código MO2006-00459. Además ha recibido el Eurolabel de calidad por parte de la ECTNA (European Chemistry Thematic Network Association) el 21-02-2013 por el periodo 2010-2015.

El máster se ha sometido recientemente a verificación por el procedimiento abreviado. Es un máster Interuniversitario Europeo en el que la Universidad Autónoma de Madrid actúa como coordinadora tanto a nivel nacional como internacional, que está aprobado ya en las siguientes universidades españolas:

Universidad Autónoma de Madrid
Universidad de Barcelona
Universidad de Cantabria
Universidad de Extremadura
Universidad de las Islas Baleares
Universidad Jaume I de Castellón
Universidad de Murcia

Universidad de Oviedo
Universidad del País Vasco
Universidad de Salamanca
Universidad de Santiago de Compostela
Universidad de Valencia
Universidad de Valladolid
Universidad de Vigo

Como tal Máster Europeo, engloba un consorcio de 46 Universidades de ocho países (Bélgica, España, Francia, Holanda, Italia, Polonia, Portugal y Suecia).

El máster consta de 2 años (120 créditos) y ha sido evaluado positivamente por diversas agencias españolas e internacionales:

- Es el primer Euromaster en Química, ya que ha recibido el Eurolabel otorgado por la ECTNA (European Chemistry Thematic Network Association <http://ectn-assoc.cpe.fr/>) después de la evaluación realizada por el correspondiente Comité Internacional.
- Ha recibido igualmente evaluación positiva de:
 - ✗ La ANECA. Memoria presentada por la Universidad de Oviedo
 - ✗ Agencia de Calidad, Acreditación y Prospectiva de las Universidades de Madrid (ACAP).
 - ✗ La Comisión Valenciana de Acreditación y Evaluación de la Calidad. Memoria presentada por la Universidad de Valencia.
 - ✗ La Agencia de Calidad de las Islas Baleares (AQUIB). Memoria presentada por la Universidad de las Islas Baleares.
 - ✗ La Agencia para la Calidad del Sistema Universitario Gallego (ACSUG). Memoria presentada por las Universidades de Vigo y Santiago de Compostela.

Este Máster tiene su origen en un Programa de Doctorado Interuniversitario que ha venido funcionando en España desde el curso 1999/2000, siempre con Mención de Calidad y con participación de la Universidad de Salamanca, una de las Universidades fundadoras del programa de Doctorado. La mención que renovada en la última convocatoria a solicitud de la Universidad del País Vasco (código MCD2003-00675) que representa a las Universidades que aún no han culminado el proceso de su transformación a Máster + Doctorado.

Respecto a la solicitud de 2006 se han introducido modificaciones menores específicamente para adaptarse a la normativa europea exigida por la ECTNA en su informe de evaluación para la obtención de Eurolabel y por la legislación española promulgada con posterioridad a la puesta en marcha del Máster.

<i>ESTRUCTURA DEL MASTER</i>			
<i>ASIGNATURA</i>	<i>CURSO</i>	<i>TIPO</i>	<i>ECTS</i>
<i>Complementos Formativos¹</i>			
Curso de Nivelación en Química*	1	OP	5.0
Curso de Nivelación en Física*	1	OP	5.0
Curso de Nivelación en Matemáticas*	1	OP	5.0
<i>Módulo 1. Fundamentos (20 ECTS)²</i>			
Curso de Lengua Europea*	1	OB	5.0
Fundamentos Matemáticos de la Mecánica Cuántica	1	OB	5.0
Mecánica Estadística y aplicaciones en simulación	1	OB	5.0
Simetría en átomos, moléculas y sólidos	1	OB	5.0
<i>Módulo 2. Métodos (15 ECTS)</i>			
Técnicas Computacionales y Cálculo Numérico	1	OB	5.0
Métodos de la Química Teórica I	1	OB	5.0
Métodos de la Química Teórica II	1	OB	5.0
<i>Módulo 3. Optatividad (25 ECTS)</i>			
Profundización en los métodos de la Química Teórica	1	OP	5.0
Dinámica de las Reacciones Químicas	1	OP	5.0
Estados Excitados	1	OP	5.0
Sólidos	1	OP	5.0
Linux y Linux de gestión*	1	OP	5.0
Laboratorio de Química Teórica Aplicada*	1	OP	5.0
Láseres*	1	OP	5.0
Bioquímica Computacional*	1	OP	5.0
<i>Módulo 4. Aspectos avanzados (15 ECTS)</i>			
Teoría Avanzada de la Estructura Electrónica y de la Materia Condensada	2	OB	9.0
Técnicas Computacionales Avanzadas	2	OB	6.0
<i>Módulo 5. Modelización avanzada y aplicaciones (15 ECTS)</i>			
Dinámica Química y Molecular y Simulación y Modelización por Ordenador	2	OB	9.0
Aplicaciones	2	OB	6.0
<i>Módulo 6. Trabajo Fin de Máster (30 ECTS)</i>			
Trabajo Fin de Máster	2	OB	30.0

* Asignaturas que se impartirán localmente en la Universidad de Salamanca.

1 Los estudiantes que, a criterio del Tutor o de la Comisión Académica, necesiten mejorar su nivel en Matemáticas, Física o Química, cursarán 10 créditos ECTS para cubrir el objetivo docente de disponer de conocimientos suficientes en "aspectos básicos" necesarios para el resto de las materias. Las materias corresponderán a asignaturas de 5 créditos correspondientes a Aspectos Básicos de Química, Aspectos Básicos de Física y Aspectos Básicos de Matemáticas. No se admitirán estudiantes que, por sus carencias formativas, necesitarían cursar las tres asignaturas ofertadas en esta materia.

2 Los estudiantes que no acrediten de forma documental conocimientos de un segundo idioma europeo, podrán cursar esta materia en el Servicio Central de Idiomas de la Universidad de Salamanca, al nivel que establezca el Tutor o la Comisión Académica.

3. DETALLES DEL DESARROLLO DEL MASTER

El Máster consta en su totalidad de 120 créditos ECTS, distribuidos en dos cursos (60+60).

La docencia correspondiente al primer curso (salvo las asignaturas marcadas con *, que se impartirán en la Universidad de Salamanca) se desarrollan en un curso intensivo de 1 mes de duración de clases teóricas y prácticas y que se imparte de manera rotatoria en una Universidad española del Consorcio. Las clases del curso se imparten en inglés. Este curso es seguido por trabajos tutelados que desarrolla cada alumno en su Universidad a lo largo del año bajo la supervisión de un tutor.

Los Módulos 4 y 5 (30 créditos) se desarrollan en un curso intensivo de 1 mes de duración de clases teóricas y prácticas y que se imparte de manera rotatoria en una Universidad europea del Consorcio. Las clases de este curso se imparten en inglés. Este curso es seguido por trabajos tutelados que desarrolla cada alumno en su Universidad a lo largo del año bajo la supervisión de un tutor.

El Módulo 6 (Trabajo Fin de Máster, 30 créditos) se puede desarrollar de manera parcial o total en una Universidad europea del Consorcio distinta de la originaria del alumno.

Se dispone de una página web para el Máster Europeo (www.emtccm.org) donde se encuentra la información detallada acerca de la organización de dicho Máster.

BIOQUÍMICA COMPUTACIONAL

1.- Datos de la Asignatura

Código		Plan		ECTS	5.0
Carácter	Optativa	Curso	1.º	Periodicidad	
Área	Química Física				
Departamento	Química Física				
Plataforma Virtual	Plataforma:				
	URL de Acceso:				

Datos del profesorado

Profesor Coordinador	Susana Gómez Carrasco	Grupo / s	
Departamento	Química Física		
Área	Química Física		
Centro	Facultad de Ciencias Químicas		
Despacho	C3511		
Horario de tutorías	A decidir en función de horarios		
URL Web			
E-mail	susana.gomez@usal.es	Teléfono	923294485

Profesor	Mª Dolores González Sánchez	Grupo / s	
Departamento	Química Física		
Área	Química Física		
Centro	Facultad de Ciencias Química		
Despacho	C3501		
Horario de tutorías	A decidir en función de horarios		

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

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

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

3.- Recomendaciones previas

Haber cursado un Grado o Licenciatura en Química o titulación equivalente.
--

4.- Objetivos de la asignatura

--

5.- Contenidos

1. Programas de visualización molecular.
2. Uso de programas de cálculo basados en métodos de estructura electrónica.
3. Análisis de las superficies de energía potencial.
4. Optimización de la geometría molecular.
5. Modelización de sistemas químicos y bioquímicos en disolución.
6. Modelización de biomoléculas: métodos de mecánica molecular.
7. Modelización de reacciones enzimáticas: métodos híbridos de mecánica cuántica y mecánica molecular.
8. Métodos estadísticos. Cálculos de parámetros cinéticos y termodinámicos de la reacción química.

6.- Competencias a adquirir

Específicas.

- El estudiante demuestra su conocimiento y comprensión de los hechos aplicando conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química Teórica y Modelización Computacional.
- Ampliar y/o adquirir conocimiento de los métodos básicos de la Química Cuántica y evaluar críticamente su aplicabilidad.
- Adquirir 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.
- Conocer, manejar e interpretar las técnicas computacionales más comunes empleadas en la resolución de problemas químicos.
- Manejar las principales fuentes de información científica, siendo capaces de buscar información relevante en internet, de las bases de datos bibliográficas y de la lectura crítica de trabajos científicos.
- Presentar públicamente los resultados de una investigación, comunicar las conclusiones a un tribunal especializado, personas u organizaciones interesadas y debate con sus miembros aspectos relativos a los mismos.
- Los estudiantes adquieren los conocimientos prácticos necesarios para llevar a cabo estudios en sistemas bioquímicos utilizando simulaciones computacionales.

Básicas/Generales.

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

- Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios
- Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones -y los conocimientos y razones últimas que las sustentan- a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades
- Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.
- Los estudiantes deben ser capaces de fomentar, en contextos académicos y profesionales, el avance tecnológico y científico dentro de una sociedad basada en el conocimiento y en el respeto a: a) los derechos fundamentales y de igualdad de oportunidades entre hombres y mujeres, b) los principios de igualdad de oportunidades y accesibilidad universal de las personas con discapacidad y c) los valores propios de una cultura de paz y de valores democráticos.
- El estudiante es capaz de adaptarse a diferentes entornos culturales.
- El estudiante es capaz de resolver problemas y tomar decisiones.
- El estudiante es organizado en el trabajo y sabe gestionar el tiempo.

Transversales.

7.- Metodologías docentes

Actividades teóricas (dirigidas por el profesor): Sesión magistral.

Actividades prácticas guiadas (dirigidas por el profesor): Prácticas en aulas informáticas. Seminarios.

Atención personalizada (dirigida por el profesor): Tutorías. Actividades de seguimiento on-line.

8.- Previsión de distribución de las metodologías docentes

	Horas dirigidas por el profesor		Horas de trabajo autónomo	HORAS TOTALES
	Horas presenciales.	Horas no presenciales.		
Sesiones magistrales	20		30	50

		Horas dirigidas por el profesor		Horas de trabajo autónomo	HORAS TOTALES
		Horas presenciales.	Horas no presenciales.		
Prácticas	- En aula				
	- En el laboratorio				
	- En aula de informática	18		14	32
	- De campo				
	- De visualización (visu)				
Seminarios		7		11	18
Exposiciones y debates					
Tutorías		2		3	5
Actividades de seguimiento online					
Preparación de trabajos					
Otras actividades (detallar)					
Exámenes		3			3
TOTAL		50		58	108

9.- Recursos

Libros de consulta para el alumno
Otras referencias bibliográficas, electrónicas o cualquier otro tipo de recurso.

10.- Evaluación

Consideraciones Generales
Las calificaciones, de acuerdo con la legislación vigente, se realizan en una escala numérica de 0-10, con un decimal.

Criterios de evaluación
Convocatoria ordinaria. E01 10% E02 30% E06 60%
Convocatoria extraordinaria E08 40% E07 60%
Instrumentos de evaluación
E01. Asistencia y participación en las clases magistrales. E02. Realización de controles (tests) a lo largo del curso. E03. Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura. E04. Discusión en tutorías y seminarios sobre los ejercicios, trabajos o prácticas realizadas en la asignatura. E05. Evaluación continua del alumno mediante preguntas y cuestiones orales durante el desarrollo de las prácticas E06. Realización y defensa de un informe sobre los casos prácticos planteados por el profesor en clase. E07. Realización de un examen escrito al final del curso E08. Realización de un examen de carácter práctico al final del curso. E10. Realización y defensa pública y oral ante un tribunal evaluador del informe escrito sobre el trabajo de investigación original realizado por el estudiante. E11. Examen parcial.
Recomendaciones para la evaluación.
Recomendaciones para la recuperación.

DINÁMICA DE LAS REACCIONES QUÍMICAS

1.- Datos de la Asignatura

Código		Plan		ECTS	5.0
Carácter	Optativa	Curso	1.º	Periodicidad	
Área					
Departamento					
Plataforma Virtual	Plataforma:				
	URL de Acceso:				

Datos del profesorado

Profesor Coordinador	Por determinar (consultar http://www.emtccm.org)	Grupo / s	
Departamento			
Área			
Centro			
Despacho			
Horario de tutorías			
URL Web			
E-mail		Teléfono	

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

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

Perfil profesional.

Académico e investigador.

3.- Recomendaciones previas

Haber cursado un Grado o Licenciatura en Química o titulación equivalente.

4.- Objetivos de la asignatura

5.- Contenidos

- Reacciones químicas a escala microscópica: colisiones moleculares.
- Scattering y potencial: caso elástico. Observables experimentales.
- Superficies de energía potencial. Colisiones inelásticas y reactivas.
- Métodos teóricos en Dinámica Molecular:
 - o Método de trayectorias.
 - o Cálculos mecano-cuánticos.
- Aspectos experimentales de la Dinámica de Reacciones Químicas.
- Dinámica en estados excitados
 - o Propagación de paquetes de onda
 - o Funciones de correlación
 - o Espectroscopia Pump-Probe
 - o Dinámicas Norn-Oppenheimer y de Ehrenfest
 - o Dinámicas no adiabáticas: Tullysurfacehopping.

6.- Competencias a adquirir

Específicas.

- El estudiante demuestra su conocimiento y comprensión de los hechos aplicando conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química Teórica y Modelización Computacional.

- Manejar las principales fuentes de información científica, siendo capaces de buscar información relevante en internet, de las bases de datos bibliográficas y de la lectura crítica de trabajos científicos.
- Presentar públicamente los resultados de una investigación, comunicar las conclusiones a un tribunal especializado, personas u organizaciones interesadas y debate con sus miembros aspectos relativos a los mismos.
- El estudiante debe ser capaz de desenvolverse oralmente, en una lengua extranjera, en diferentes contextos de la vida cotidiana.
- 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.

Básicas/Generales.

- Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación
- Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio
- Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones -y los conocimientos y razones últimas que las sustentan- a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades
- Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.
- Los estudiantes deben ser capaces de fomentar, en contextos académicos y profesionales, el avance tecnológico y científico dentro de una sociedad basada en el conocimiento y en el respeto a: a) los derechos fundamentales y de igualdad de oportunidades entre hombres y mujeres, b) los principios de igualdad de oportunidades y accesibilidad universal de las personas con discapacidad y c) los valores propios de una cultura de paz y de valores democráticos.
- El estudiante es capaz de adaptarse a diferentes entornos culturales.
- El estudiante posee capacidad de análisis y síntesis.
- Conocimiento de una lengua extranjera.
- El estudiante posee razonamiento crítico.

Transversales.

7.- Metodologías docentes

Actividades teóricas (dirigidas por el profesor): Sesión magistral.

Actividades prácticas guiadas (dirigidas por el profesor): Prácticas en aulas informáticas. Seminarios.

Atención personalizada (dirigida por el profesor): Tutorías. Actividades de seguimiento on-line.

8.- Previsión de distribución de las metodologías docentes

		Horas dirigidas por el profesor		Horas de trabajo autónomo	HORAS TOTALES
		Horas presenciales.	Horas no presenciales.		
Sesiones magistrales		20		30	50
Prácticas	- En aula				
	- En el laboratorio				
	- En aula de informática	18		14	32
	- De campo				
	- De visualización (visu)				
Seminarios		7		11	18
Exposiciones y debates					
Tutorías		2		3	5
Actividades de seguimiento online					
Preparación de trabajos					
Otras actividades (detallar)					
Exámenes		3			3
TOTAL		50		58	108

9.- Recursos

Libros de consulta para el alumno

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

10.- Evaluación

Consideraciones Generales
Las calificaciones, de acuerdo con la legislación vigente, se realizan en una escala numérica de 0-10, con un decimal.
Criterios de evaluación
<p>Convocatoria ordinaria. E03 60% E04 40%</p> <p>Convocatoria extraordinaria E03 30% E07 70%</p>
Instrumentos de evaluación
E01. Asistencia y participación en las clases magistrales. E02. Realización de controles (tests) a lo largo del curso. E03. Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura. E04. Discusión en tutorías y seminarios sobre los ejercicios, trabajos o prácticas realizadas en la asignatura. E05. Evaluación continua del alumno mediante preguntas y cuestiones orales durante el desarrollo de las prácticas E06. Realización y defensa de un informe sobre los casos prácticos planteados por el profesor en clase. E07. Realización de un examen escrito al final del curso E08. Realización de un examen de carácter práctico al final del curso. E10. Realización y defensa pública y oral ante un tribunal evaluador del informe escrito sobre el trabajo de investigación original realizado por el estudiante. E11. Examen parcial.
Recomendaciones para la evaluación.
Recomendaciones para la recuperación.

ESTADOS EXCITADOS
1.- Datos de la Asignatura

Código		Plan		ECTS	5.0
Carácter	Optativa	Curso	1.º	Periodicidad	
Área					
Departamento					
Plataforma Virtual	Plataforma:				
	URL de Acceso:				

Datos del profesorado

Profesor Coordinador	Por determinar (consultar http://www.emtccm.org/)	Grupo / s	
Departamento			
Área			
Centro			
Despacho			
Horario de tutorías			
URL Web			
E-mail		Teléfono	

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

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

Perfil profesional.

Académico e investigador.

3.- Recomendaciones previas

Haber cursado un Grado o Licenciatura en Química o titulación equivalente.

4.- Objetivos de la asignatura

5.- Contenidos

1. Funciones de energía potencial nuclear
 - Aproximación de Born-Oppenheimer
 - Curvas de energía potencial de moléculas diatómicas
 - Superficies de energía potencial de moléculas poliatómicas
2. Interacción de la radiación y la materia
 - Modelo clásico de la radiación electromagnética
 - Probabilidad de transición inducida por la radiación
3. Espectros rovibracionales:
 - Moléculas diatómicas: niveles de energía y reglas de selección
 - Espectros rotacionales puros y rovibracionales en diatómicas.
 - Moléculas poliatómicas: vibraciones clásica y vibraciones cuánticas.
 - Espectros rovibracionales en poliatómicas.
 - Relajación vibracional en líquidos: métodos experimentales y tratamientos teóricos
4. Conceptos básicos en Fotoquímica Molecular
 - Espectroscopía electrónica teórica; simetría, reglas de selección, naturaleza del estado excitado, acoplamiento vibrónico.
 - Superficies de energía potencial: puntos estacionarios, cruces entre superficies, caminos de mínima energía.
 - Procesos fotoquímicos: intersecciones cónicas, reacciones fotoinducidas.
5. Espectro electrónico: métodos multiconfiguracionales.
 - Métodos de cálculo de la estructura electrónica en el estado excitado.
 - Métodos Multiconfiguracionales: CAS-SCF and RASSCF.

- Problemas prácticos: elección del espacio activo, cálculos a un estado vs cálculos "state-average". Consideraciones sobre las bases de cálculo
 - El método CASPT2.
 - Problemas en el método CASPT2 y soluciones: estados intrusos, cruces evitados, mezcla de estados de valencia-Rydberg
6. Espectro electrónico: métodos TD-DFT
- Linear response TDDFT, propagación de la densidad electrónica.
 - Calculo de espectros, aproximación a los funcionales de intercambio y correlación. Ejemplos.

6.- Competencias a adquirir

Específicas.

- Comprender los fundamentos teóricos y prácticos de técnicas con las que puede analizar la estructura electrónica, morfológica y estructural de un compuesto.
- El estudiante debe ser capaz de desenvolverse oralmente, en una lengua extranjera, en diferentes contextos de la vida cotidiana.
- Los estudiantes conocen los fundamentos de los métodos utilizados para el tratamiento de estados excitados y son capaces de manejar los programas de uso más frecuente para el tratamiento de estados excitados.

Básicas/Generales.

- Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación
- Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio
- Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones -y los conocimientos y razones últimas que las sustentan- a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades
- Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.
- Los estudiantes deben ser capaces de fomentar, en contextos académicos y profesionales, el avance tecnológico y científico dentro de una sociedad basada en el conocimiento y en el respeto a: a) los derechos fundamentales y de igualdad de oportunidades entre hombres y mujeres, b) los principios de igualdad de oportunidades y accesibilidad universal de las personas con discapacidad y c) los valores propios de una cultura de paz y de valores democráticos.
- El estudiante es capaz de adaptarse a diferentes entornos culturales.
- Conocimiento de una lengua extranjera.

Transversales.

7.- Metodologías docentes

Actividades teóricas (dirigidas por el profesor): Sesión magistral.
 Actividades prácticas guiadas (dirigidas por el profesor): Seminarios.
 Atención personalizada (dirigida por el profesor): Tutorías. Actividades de seguimiento on-line.

8.- Previsión de distribución de las metodologías docentes

	Horas dirigidas por el profesor		Horas de trabajo autónomo	HORAS TOTALES
	Horas presenciales.	Horas no presenciales.		
Sesiones magistrales	25		37	62
Prácticas	- En aula			
	- En el laboratorio			
	- En aula de informática			
	- De campo			
	- De visualización (visu)			
Seminarios	20		30	50
Exposiciones y debates				
Tutorías	2		3	5
Actividades de seguimiento online				
Preparación de trabajos				
Otras actividades (detallar)				
Exámenes	3			3
TOTAL	50		70	120

9.- Recursos

Libros de consulta para el alumno

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

10.- Evaluación

Consideraciones Generales

Las calificaciones, de acuerdo con la legislación vigente, se realizan en una escala numérica de 0-10, con un decimal.

Criterios de evaluación

Convocatoria ordinaria.

E03 60%

E04 40%

Convocatoria extraordinaria

E03 30%

E07 70%

Instrumentos de evaluación

E01. Asistencia y participación en las clases magistrales.

E02. Realización de controles (tests) a lo largo del curso.

E03. Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura.

E04. Discusión en tutorías y seminarios sobre los ejercicios, trabajos o prácticas realizadas en la asignatura.

E05. Evaluación continua del alumno mediante preguntas y cuestiones orales durante el desarrollo de las prácticas

E06. Realización y defensa de un informe sobre los casos prácticos planteados por el profesor en clase.

E07. Realización de un examen escrito al final del curso

E08. Realización de un examen de carácter práctico al final del curso.

E10. Realización y defensa pública y oral ante un tribunal evaluador del informe escrito sobre el trabajo de investigación original realizado por el estudiante.

E11. Examen parcial.

Recomendaciones para la evaluación.

Recomendaciones para la recuperación.

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

Código		Plan		ECTS	5.0
Carácter	Obligatoria	Curso	1.º	Periodicidad	
Área					
Departamento					
Plataforma Virtual	Plataforma:				
	URL de Acceso:				

Datos del profesorado

Profesor Coordinador	Por determinar (consultar http://www.emtccm.org/)	Grupo / s	
Departamento			
Área			
Centro			
Despacho			
Horario de tutorías			
URL Web			
E-mail		Teléfono	

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

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

Perfil profesional.

Académico e investigador.

3.- Recomendaciones previas

Haber cursado un Grado o Licenciatura en Química o titulación equivalente.

4.- Objetivos de la asignatura

5.- Contenidos

- 1- Introducción y conceptos básicos de álgebra
- 2- Espacios funcionales
- 3- Postulados de la Mecánica Cuántica
- 4- Principales Teoremas en Mecánica Cuántica
- 5- Momento angular, Spin. Composición de momentos.
- 6- Métodos de variaciones y perturbaciones (independiente y dependiente del tiempo)
- 7- Partículas independientes e idénticas
- 8- Sistemas polielectrónicos
- 9- Segunda cuantización

6.- Competencias a adquirir

Específicas.

- El estudiante demuestra su conocimiento y comprensión de los hechos aplicando conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química Teórica y Modelización Computacional.
- Comprender los fundamentos teóricos y prácticos de técnicas con las que puede analizar la estructura electrónica, morfológica y estructural de un compuesto.
- El estudiante está familiarizado con los postulados fundamentales de la Mecánica Cuántica necesarios para un buen entendimiento de los métodos más comunes utilizados en química cuántica.

- El estudiante comprende y maneja las herramientas matemáticas requeridas para el desarrollo de la Química Teórica en sus aspectos fundamentales y sus aplicaciones.

Básicas/Generales.

- Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación
- Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio
- Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios
- Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones -y los conocimientos y razones últimas que las sustentan- a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades
- Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.
- Los estudiantes deben ser capaces de fomentar, en contextos académicos y profesionales, el avance tecnológico y científico dentro de una sociedad basada en el conocimiento y en el respeto a: a) los derechos fundamentales y de igualdad de oportunidades entre hombres y mujeres, b) los principios de igualdad de oportunidades y accesibilidad universal de las personas con discapacidad y c) los valores propios de una cultura de paz y de valores democráticos.
- El estudiante es capaz de adaptarse a diferentes entornos culturales.
- El estudiante es capaz de resolver problemas y tomar decisiones.
- El estudiante es capaz de trabajar en equipo tanto a nivel multidisciplinar como con sus propios pares.
- El estudiante es organizado en el trabajo y sabe gestionar el tiempo.

Transversales.

7.- Metodologías docentes

Actividades teóricas (dirigidas por el profesor): Sesión magistral.

Actividades prácticas guiadas (dirigidas por el profesor): Seminarios.

Atención personalizada (dirigida por el profesor): Tutorías. Actividades de seguimiento on-line.

8.- Previsión de distribución de las metodologías docentes

		Horas dirigidas por el profesor		Horas de trabajo autónomo	HORAS TOTALES
		Horas presenciales.	Horas no presenciales.		
Sesiones magistrales		30		45	75
Prácticas	- En aula				
	- En el laboratorio				
	- En aula de informática				
	- De campo				
	- De visualización (visu)				
Seminarios		12		18	30
Exposiciones y debates					
Tutorías		5		7	12
Actividades de seguimiento online					
Preparación de trabajos					
Otras actividades (detallar)					
Exámenes		3			3
TOTAL		50		70	120

9.- Recursos

Libros de consulta para el alumno
Otras referencias bibliográficas, electrónicas o cualquier otro tipo de recurso.

10.- Evaluación**Consideraciones Generales**

Las calificaciones, de acuerdo con la legislación vigente, se realizan en una escala numérica de 0-10, con un decimal.

Criterios de evaluación**Convocatoria ordinaria.**

E03 60%

E04 40%

Convocatoria extraordinaria

E03 30%

E07 70%

Instrumentos de evaluación

E01. Asistencia y participación en las clases magistrales.

E02. Realización de controles (tests) a lo largo del curso.

E03. Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura.

E04. Discusión en tutorías y seminarios sobre los ejercicios, trabajos o prácticas realizadas en la asignatura.

E05. Evaluación continua del alumno mediante preguntas y cuestiones orales durante el desarrollo de las prácticas

E06. Realización y defensa de un informe sobre los casos prácticos planteados por el profesor en clase.

E07. Realización de un examen escrito al final del curso

E08. Realización de un examen de carácter práctico al final del curso.

E10. Realización y defensa pública y oral ante un tribunal evaluador del informe escrito sobre el trabajo de investigación original realizado por el estudiante.

E11. Examen parcial.

Recomendaciones para la evaluación.**Recomendaciones para la recuperación.**

LABORATORIO DE QUÍMICA TEÓRICA APLICADA

1.- Datos de la Asignatura

Código		Plan		ECTS	5.0
Carácter	Optativa	Curso	1.º	Periodicidad	
Área	Química Física				
Departamento	Química Física				
Plataforma Virtual	Plataforma:				
	URL de Acceso:				

Datos del profesorado

Profesor Coordinador	Susana Gómez Carrasco	Grupo / s	
Departamento	Química Física		
Área	Química Física		
Centro	Facultad de Ciencias Químicas		
Despacho	C3511		
Horario de tutorías	A decidir en función de horarios		
URL Web			
E-mail	susana.gomez@usal.es	Teléfono	923294485

Profesor	Mª Dolores González Sánchez	Grupo / s	
Departamento	Química Física		
Área	Química Física		
Centro	Facultad de Ciencias Química		
Despacho	C3501		
Horario de tutorías	A decidir en función de horarios		

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

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

Bloque formativo al que pertenece la materia

Módulo 3. Optatividad

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

Perfil profesional.

Académico e investigador.

3.- Recomendaciones previas

Haber cursado un Grado o Licenciatura en Química o titulación equivalente.

4.- Objetivos de la asignatura

--

5.- Contenidos

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

6.- Competencias a adquirir

Específicas.

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

Básicas/Generales.

- Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación
- Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio
- Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios
- Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones -y los conocimientos y razones últimas que las sustentan- a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades
- Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.
- Los estudiantes deben ser capaces de fomentar, en contextos académicos y profesionales, el avance tecnológico y científico dentro de una sociedad basada en el conocimiento y en el respeto a: a) los derechos fundamentales y de igualdad de oportunidades entre hombres y mujeres, b) los principios de igualdad de oportunidades y accesibilidad universal de las personas con discapacidad y c) los valores propios de una cultura de paz y de valores democráticos.
- El estudiante posee capacidad de análisis y síntesis.
- El estudiante es organizado en el trabajo y sabe gestionar el tiempo.

Transversales.

7.- Metodologías docentes

Actividades teóricas (dirigidas por el profesor): Sesión magistral.
 Actividades prácticas guiadas (dirigidas por el profesor): Prácticas en aulas informáticas. Seminarios.
 Atención personalizada (dirigida por el profesor): Tutorías. Actividades de seguimiento on-line.

8.- Previsión de distribución de las metodologías docentes

		Horas dirigidas por el profesor		Horas de trabajo autónomo	HORAS TOTALES
		Horas presenciales.	Horas no presenciales.		
Sesiones magistrales		20		30	50
Prácticas	- En aula				
	- En el laboratorio				
	- En aula de informática	18		14	32
	- De campo				
	- De visualización (visu)				
Seminarios		7		11	18
Exposiciones y debates					
Tutorías		2		3	5
Actividades de seguimiento online					
Preparación de trabajos					
Otras actividades (detallar)					
Exámenes		3			3
TOTAL		50		58	108

9.- Recursos

Libros de consulta para el alumno
Otras referencias bibliográficas, electrónicas o cualquier otro tipo de recurso.

10.- Evaluación

Consideraciones Generales
Las calificaciones, de acuerdo con la legislación vigente, se realizan en una escala numérica de 0-10, con un decimal.
Criterios de evaluación
<p>Convocatoria ordinaria. E03 60% E04 40%</p> <p>Convocatoria extraordinaria E03 30% E07 70%</p>
Instrumentos de evaluación
E01. Asistencia y participación en las clases magistrales. E02. Realización de controles (tests) a lo largo del curso. E03. Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura. E04. Discusión en tutorías y seminarios sobre los ejercicios, trabajos o prácticas realizadas en la asignatura. E05. Evaluación continua del alumno mediante preguntas y cuestiones orales durante el desarrollo de las prácticas E06. Realización y defensa de un informe sobre los casos prácticos planteados por el profesor en clase. E07. Realización de un examen escrito al final del curso E08. Realización de un examen de carácter práctico al final del curso. E10. Realización y defensa pública y oral ante un tribunal evaluador del informe escrito sobre el trabajo de investigación original realizado por el estudiante. E11. Examen parcial.

Recomendaciones para la evaluación.

Recomendaciones para la recuperación.

LÁSERES

1.- Datos de la Asignatura

Código		Plan		ECTS	5.0
Carácter	Optativa	Curso	1.º	Periodicidad	
Área	Química Física				
Departamento	Química Física				
Plataforma Virtual	Plataforma:				
	URL de Acceso:				

Datos del profesorado

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

Profesor	Susana Gómez Carrasco	Grupo / s	
Departamento	Química Física		
Área	Química Física		
Centro	Facultad de Ciencias Química		
Despacho	C3511		
Horario de tutorías	A decidir en función de horarios		

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

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

Bloque formativo al que pertenece la materia

Módulo 3. Optatividad

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

Perfil profesional.

Académico e investigador.

3.- Recomendaciones previas

Haber cursado un Grado o Licenciatura en Química o titulación equivalente.

4.- Objetivos de la asignatura

--

5.- Contenidos

- 1. Introducción.** ¿Qué es un láser? ¿Para qué se usa? Características de la luz láser.
- 2. Propiedades del láser.** Niveles de energía. Formación de líneas espectrales: coeficientes de Einstein. Emisión espontánea y estimulada. Inversión de población y saturación. Ensanchamiento de líneas espectrales. Ejemplos prácticos de láseres.
- 3. Láseres de onda continua (cw) y láseres pulsados.** Generación de láseres de onda continua. Reducción del ancho de banda. Formación de láseres pulsados por Q-switching y por modelocking. Segundo armónico. Pulsos láseres de atosegundos y trenes de pulsos de atosegundos.
- 4. Interacción láser-materia.** Descripción clásica y cuántica. Procesos multifotónicos y efecto túnel. Modelo de los tres pasos. Generación de armónicos altos. Doble ionización. Moléculas: aproximación de Born-Oppenheimer. Explosión coulombiana.
- 5. Efectos de campo intenso.** Frecuencias de Rabi. Desplazamiento Stark. Ionización por encima del umbral (ATI). Estados vestidos. Estados de Volkov y de Floquet. Aproximación de campo intenso. Moléculas: bond softening. Ionización aumentada.
- 6. Tratamiento teórico.** Bases de estados en el continuo electrónico: B-splines. Integración directa de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo. Métodos híbridos. Teoría del funcional de la densidad dependiente del tiempo (TDDFT).
- 7. Espectroscopía resuelta en el tiempo.** Esquemas de pump-probe con pulsos láser. Usos en femtoquímica y atofísica.
- 8. Control coherente de reacciones químicas.** Control del ratio entre ionización y disociación. Control óptimo.

6.- Competencias a adquirir

Específicas.

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

Básicas/Generales.

- Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación
- Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio
- Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios

- Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones -y los conocimientos y razones últimas que las sustentan- a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades
- Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.
- Los estudiantes deben ser capaces de fomentar, en contextos académicos y profesionales, el avance tecnológico y científico dentro de una sociedad basada en el conocimiento y en el respeto a: a) los derechos fundamentales y de igualdad de oportunidades entre hombres y mujeres, b) los principios de igualdad de oportunidades y accesibilidad universal de las personas con discapacidad y c) los valores propios de una cultura de paz y de valores democráticos.

Transversales.

7.- Metodologías docentes

Actividades teóricas (dirigidas por el profesor): Sesión magistral.
 Atención personalizada (dirigida por el profesor): Tutorías. Actividades de seguimiento on-line.

8.- Previsión de distribución de las metodologías docentes

		Horas dirigidas por el profesor		Horas de trabajo autónomo	HORAS TOTALES
		Horas presenciales.	Horas no presenciales.		
Sesiones magistrales		40		60	100
Prácticas	- En aula				
	- En el laboratorio				
	- En aula de informática				
	- De campo				
	- De visualización (visu)				
Seminarios					
Exposiciones y debates					
Tutorías		7		3	10
Actividades de seguimiento online					

	Horas dirigidas por el profesor		Horas de trabajo autónomo	HORAS TOTALES
	Horas presenciales.	Horas no presenciales.		
Preparación de trabajos				
Otras actividades (detallar)				
Exámenes	3			3
TOTAL	50		63	113

9.- Recursos

Libros de consulta para el alumno
Otras referencias bibliográficas, electrónicas o cualquier otro tipo de recurso.

10.- Evaluación

Consideraciones Generales
Las calificaciones, de acuerdo con la legislación vigente, se realizan en una escala numérica de 0-10, con un decimal.
Criterios de evaluación
<p>Convocatoria ordinaria. E03 60% E04 40%</p> <p>Convocatoria extraordinaria E03 30% E07 70%</p>

Instrumentos de evaluación

- E01. Asistencia y participación en las clases magistrales.
- E02. Realización de controles (tests) a lo largo del curso.
- E03. Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura.
- E04. Discusión en tutorías y seminarios sobre los ejercicios, trabajos o prácticas realizadas en la asignatura.
- E05. Evaluación continua del alumno mediante preguntas y cuestiones orales durante el desarrollo de las prácticas
- E06. Realización y defensa de un informe sobre los casos prácticos planteados por el profesor en clase.
- E07. Realización de un examen escrito al final del curso
- E08. Realización de un examen de carácter práctico al final del curso.
- E10. Realización y defensa pública y oral ante un tribunal evaluador del informe escrito sobre el trabajo de investigación original realizado por el estudiante.
- E11. Examen parcial.

Recomendaciones para la evaluación.**Recomendaciones para la recuperación.**

LENGUA EUROPEA (INGLÉS)

1.- Datos de la Asignatura

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

Datos del profesorado

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

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

Bloque formativo al que pertenece la materia
Módulo 1. Fundamentos
Papel de la asignatura dentro del Bloque formativo y del Plan de Estudios.
Completar o adquirir la capacidad de oral y escrita necesaria para leer textos científicos en inglés y seguir clases explicadas por no nativos.

Perfil profesional.

Académico e investigador.

3.- Recomendaciones previas

Haber cursado un Grado o Licenciatura en Química o titulación equivalente.

4.- Objetivos de la asignatura

Se busca que esta asignatura garantice un nivel mínimo de conocimiento de una lengua extranjera (inglés), que permita a los estudiantes seguir el Máster con normalidad.

5.- Contenidos

6.- Competencias a adquirir

Específicas.

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

Básicas/Generales.

- Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones -y los conocimientos y razones últimas que las sustentan- a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades
- El estudiante es capaz de trabajar en equipo tanto a nivel multidisciplinar como con sus propios pares.
- El estudiante es organizado en el trabajo y sabe gestionar el tiempo.
- Conocimiento de una lengua extranjera.
- El estudiante posee razonamiento crítico.

Transversales.

7.- Metodologías docentes

Actividades teóricas (dirigidas por el profesor): Sesión magistral.
 Actividades prácticas guiadas (dirigidas por el profesor): Seminarios. Exposiciones. Debates.
 Atención personalizada (dirigida por el profesor): Tutorías.

8.- Previsión de distribución de las metodologías docentes

	Horas dirigidas por el profesor		Horas de trabajo autónomo	HORAS TOTALES
	Horas presenciales.	Horas no presenciales.		
Sesiones magistrales	18		27	45
Prácticas	- En aula			
	- En el laboratorio			
	- En aula de informática			
	- De campo			
	- De visualización (visu)			
Seminarios	18		27	45
Exposiciones y debates	7		10	17
Tutorías	4		7	11
Actividades de seguimiento online				
Preparación de trabajos				
Otras actividades (detallar)				
Exámenes	3			3
TOTAL	50		71	121

9.- Recursos

Libros de consulta para el alumno

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

10.- Evaluación

Criterios de evaluación

Convocatoria ordinaria.

E02 10%

E03 20%

E07 60%

E11 10%

Convocatoria extraordinaria

E02 10%

E03 20%

E07 60%

E11 10%

Instrumentos de evaluación

E01. Asistencia y participación en las clases magistrales.

E02. Realización de controles (tests) a lo largo del curso.

E03. Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura.

E04. Discusión en tutorías y seminarios sobre los ejercicios, trabajos o prácticas realizadas en la asignatura.

E05. Evaluación continua del alumno mediante preguntas y cuestiones orales durante el desarrollo de las prácticas

E06. Realización y defensa de un informe sobre los casos prácticos planteados por el profesor en clase.

E07. Realización de un examen escrito al final del curso

E08. Realización de un examen de carácter práctico al final del curso.

E10. Realización y defensa pública y oral ante un tribunal evaluador del informe escrito sobre el trabajo de investigación original realizado por el estudiante.

E11. Examen parcial.

Recomendaciones para la evaluación.

Recomendaciones para la recuperación.

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

Código		Plan		ECTS	5.0
Carácter	Optativa	Curso	1.º	Periodicidad	
Área	Química Física				
Departamento	Química Física				
Plataforma Virtual	Plataforma:				
	URL de Acceso:				

Datos del profesorado

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

Profesor	Susana Gómez Carrasco	Grupo / s	
Departamento	Química Física		
Área	Química Física		
Centro	Facultad de Ciencias Química		
Despacho	C3511		
Horario de tutorías	A decidir en función de horarios		

URL Web			
E-mail	susana.gomez@usal.es	Teléfono	923294485

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

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

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

3.- Recomendaciones previas

Haber cursado un Grado o Licenciatura en Química o titulación equivalente.
--

4.- Objetivos de la asignatura

--

5.- Contenidos

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

6.- Competencias a adquirir

Específicas.

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

Básicas/Generales.

- Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación
- Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio
- Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios
- Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones -y los conocimientos y razones últimas que las sustentan- a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades
- Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.
- Los estudiantes deben ser capaces de fomentar, en contextos académicos y profesionales, el avance tecnológico y científico dentro de una sociedad basada en el conocimiento y en el respeto a: a) los derechos fundamentales y de igualdad de oportunidades entre hombres y mujeres, b) los principios de igualdad de oportunidades y accesibilidad universal de las personas con discapacidad y c) los valores propios de una cultura de paz y de valores democráticos.
- El estudiante posee capacidad de análisis y síntesis.
- El estudiante es organizado en el trabajo y sabe gestionar el tiempo.

Transversales.

7.- Metodologías docentes

Actividades teóricas (dirigidas por el profesor): Sesión magistral.
 Actividades prácticas guiadas (dirigidas por el profesor): Prácticas en aulas informáticas. Seminarios.
 Atención personalizada (dirigida por el profesor): Tutorías. Actividades de seguimiento on-line.

8.- Previsión de distribución de las metodologías docentes

	Horas dirigidas por el profesor		Horas de trabajo autónomo	HORAS TOTALES	
	Horas presenciales.	Horas no presenciales.			
Sesiones magistrales	20		30	50	
Prácticas	- En aula				
	- En el laboratorio				
	- En aula de informática	18		14	32
	- De campo				
- De visualización (visu)					
Seminarios	7		11	18	
Exposiciones y debates					
Tutorías	2		3	5	
Actividades de seguimiento online					
Preparación de trabajos					
Otras actividades (detallar)					
Exámenes	3			3	
TOTAL	50		58	108	

9.- Recursos

Libros de consulta para el alumno

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

10.- Evaluación

Consideraciones Generales

Las calificaciones, de acuerdo con la legislación vigente, se realizan en una escala numérica de 0-10, con un decimal.

Criterios de evaluación

Convocatoria ordinaria.

E03 60%

E04 40%

Convocatoria extraordinaria

E03 30%

E07 70%

Instrumentos de evaluación

E01. Asistencia y participación en las clases magistrales.

E02. Realización de controles (tests) a lo largo del curso.

E03. Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura.

E04. Discusión en tutorías y seminarios sobre los ejercicios, trabajos o prácticas realizadas en la asignatura.

E05. Evaluación continua del alumno mediante preguntas y cuestiones orales durante el desarrollo de las prácticas

E06. Realización y defensa de un informe sobre los casos prácticos planteados por el profesor en clase.

E07. Realización de un examen escrito al final del curso

E08. Realización de un examen de carácter práctico al final del curso.

E10. Realización y defensa pública y oral ante un tribunal evaluador del informe escrito sobre el trabajo de investigación original realizado por el estudiante.

E11. Examen parcial.

Recomendaciones para la evaluación.

Recomendaciones para la recuperación.

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

Código		Plan		ECTS	5.0
Carácter	Obligatoria	Curso	1.º	Periodicidad	
Área					
Departamento					
Plataforma Virtual	Plataforma:				
	URL de Acceso:				

Datos del profesorado

Profesor Coordinador	Por determinar (consultar http://www.emtccm.org/)	Grupo / s	
Departamento			
Área			
Centro			
Despacho			
Horario de tutorías			
URL Web			
E-mail		Teléfono	

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

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

Perfil profesional.

Académico e investigador.

3.- Recomendaciones previas

Haber cursado un Grado o Licenciatura en Química o titulación equivalente.

4.- Objetivos de la asignatura

5.- Contenidos

1. Colectivos y postulados de la mecánica estadística.
2. Colectivos microcanónico, canónico y grancanónico.
3. Estadísticas de Fermi-Dirac, Bose-Einstein y Boltzmann.
4. Mecánica estadística clásica.
5. Aplicaciones a sistemas ideales: gases ideales, gas ideal de fotones, fonones, electrones en metales.
6. Sistemas de partículas que interactúan: gases reales diluidos, segundo coeficiente del virial, ecuación de van der Waals.
7. Métodos Monte Carlo
8. Cálculo de propiedades termodinámicas y estructurales
9. Aspectos prácticos de la simulación por ordenador

6.- Competencias a adquirir

Específicas.

- El estudiante demuestra su conocimiento y comprensión de los hechos aplicando conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química Teórica y Modelización Computacional.
- Comprender los fundamentos teóricos y prácticos de técnicas con las que puede analizar la estructura electrónica, morfológica y estructural de un compuesto.
- El estudiante comprende la base de la Mecánica Estadística formulada a partir de las colectividades.
- El estudiante debe saber calcular funciones de partición y aplicar las estadísticas cuánticas y la clásica a los sistemas ideales de interés en Química.

Básicas/Generales.

- Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación
- Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio
- Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios
- Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones -y los conocimientos y razones últimas que las sustentan- a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades
- Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.
- Los estudiantes deben ser capaces de fomentar, en contextos académicos y profesionales, el avance tecnológico y científico dentro de una sociedad basada en el conocimiento y en el respeto a: a) los derechos fundamentales y de igualdad de oportunidades entre hombres y mujeres, b) los principios de igualdad de oportunidades y accesibilidad universal de las personas con discapacidad y c) los valores propios de una cultura de paz y de valores democráticos.
- El estudiante es capaz de adaptarse a diferentes entornos culturales.
- El estudiante es capaz de resolver problemas y tomar decisiones.

Transversales.
7.- Metodologías docentes

Actividades teóricas (dirigidas por el profesor): Sesión magistral.

Actividades prácticas guiadas (dirigidas por el profesor): Seminarios.

Atención personalizada (dirigida por el profesor): Tutorías. Actividades de seguimiento on-line.

8.- Previsión de distribución de las metodologías docentes

	Horas dirigidas por el profesor		Horas de trabajo autónomo	HORAS TOTALES
	Horas presenciales.	Horas no presenciales.		
Sesiones magistrales	30		45	75

		Horas dirigidas por el profesor		Horas de trabajo autónomo	HORAS TOTALES
		Horas presenciales.	Horas no presenciales.		
Prácticas	- En aula				
	- En el laboratorio				
	- En aula de informática				
	- De campo				
	- De visualización (visu)				
Seminarios		12		18	30
Exposiciones y debates					
Tutorías		5		7	12
Actividades de seguimiento online					
Preparación de trabajos					
Otras actividades (detallar)					
Exámenes		3			3
TOTAL		50		70	120

9.- Recursos

Libros de consulta para el alumno
Otras referencias bibliográficas, electrónicas o cualquier otro tipo de recurso.

10.- Evaluación

Consideraciones Generales
Las calificaciones, de acuerdo con la legislación vigente, se realizan en una escala numérica de 0-10, con un decimal.

Criterios de evaluación
Convocatoria ordinaria. E03 60% E04 40%
Convocatoria extraordinaria E03 30% E07 70%
Instrumentos de evaluación
E01. Asistencia y participación en las clases magistrales. E02. Realización de controles (tests) a lo largo del curso. E03. Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura. E04. Discusión en tutorías y seminarios sobre los ejercicios, trabajos o prácticas realizadas en la asignatura. E05. Evaluación continua del alumno mediante preguntas y cuestiones orales durante el desarrollo de las prácticas E06. Realización y defensa de un informe sobre los casos prácticos planteados por el profesor en clase. E07. Realización de un examen escrito al final del curso E08. Realización de un examen de carácter práctico al final del curso. E10. Realización y defensa pública y oral ante un tribunal evaluador del informe escrito sobre el trabajo de investigación original realizado por el estudiante. E11. Examen parcial.
Recomendaciones para la evaluación.
Recomendaciones para la recuperación.

MÉTODOS DE LA QUÍMICA TEÓRICA I

1.- Datos de la Asignatura

Código		Plan		ECTS	5.0
Carácter	Obligatoria	Curso	1.º	Periodicidad	
Área					
Departamento					
Plataforma Virtual	Plataforma:				
	URL de Acceso:				

Datos del profesorado

Profesor Coordinador	Por determinar (consultar http://www.emtccm.org)	Grupo / s	
Departamento			
Área			
Centro			
Despacho			
Horario de tutorías			
URL Web			
E-mail		Teléfono	

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

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

Perfil profesional.

Académico e investigador.

3.- Recomendaciones previas

Haber cursado un Grado o Licenciatura en Química o titulación equivalente.

4.- Objetivos de la asignatura

5.- Contenidos

1. Métodos Ab initio:

- Metodo de Hartree-Fock: RHF y UHF
- Funciones de base, pseudopotenciales y potenciales efectivos.

Teoría de perturbaciones Moller-Plesset

- Visión general de métodos no perturbacionales basados en función de onda: Métodos de interacción de configuraciones, Métodos CoupledCluster, Métodos Multiconfiguracionales

2. Teoría del Funcional de la Densidad:

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

6.- Competencias a adquirir

Específicas.

- El estudiante demuestra su conocimiento y comprensión de los hechos aplicando conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química Teórica y Modelización Computacional.
- Comprender los fundamentos teóricos y prácticos de técnicas con las que puede analizar la estructura electrónica, morfológica y estructural de un compuesto.

- El estudiante está familiarizado con los postulados fundamentales de la Mecánica Cuántica necesarios para un buen entendimiento de los métodos más comunes utilizados en química cuántica.
- El estudiante es capaz de discernir entre los diferentes métodos existentes y cómo seleccionar el más adecuado para cada problema.

Básicas/Generales.

- Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación
- Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio
- Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios
- Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones -y los conocimientos y razones últimas que las sustentan- a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades
- Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.
- Los estudiantes deben ser capaces de fomentar, en contextos académicos y profesionales, el avance tecnológico y científico dentro de una sociedad basada en el conocimiento y en el respeto a: a) los derechos fundamentales y de igualdad de oportunidades entre hombres y mujeres, b) los principios de igualdad de oportunidades y accesibilidad universal de las personas con discapacidad y c) los valores propios de una cultura de paz y de valores democráticos.
- El estudiante es capaz de adaptarse a diferentes entornos culturales.
- El estudiante es capaz de resolver problemas y tomar decisiones.

Transversales.

7.- Metodologías docentes

Actividades teóricas (dirigidas por el profesor): Sesión magistral.

Actividades prácticas guiadas (dirigidas por el profesor): Seminarios.

Atención personalizada (dirigida por el profesor): Tutorías. Actividades de seguimiento on-line.

8.- Previsión de distribución de las metodologías docentes

		Horas dirigidas por el profesor		Horas de trabajo autónomo	HORAS TOTALES
		Horas presenciales.	Horas no presenciales.		
Sesiones magistrales		25		37	62
Prácticas	- En aula				
	- En el laboratorio				
	- En aula de informática				
	- De campo				
	- De visualización (visu)				
Seminarios		20		30	50
Exposiciones y debates					
Tutorías		2		3	5
Actividades de seguimiento online					
Preparación de trabajos					
Otras actividades (detallar)					
Exámenes		3			3
TOTAL		50		70	120

9.- Recursos

Libros de consulta para el alumno

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

10.- Evaluación

Consideraciones Generales

Las calificaciones, de acuerdo con la legislación vigente, se realizan en una escala numérica de 0-10, con un decimal.

Criterios de evaluación
<p>Convocatoria ordinaria. E03 60% E04 40%</p> <p>Convocatoria extraordinaria E03 30% E07 70%</p>
Instrumentos de evaluación
<p>E01. Asistencia y participación en las clases magistrales. E02. Realización de controles (tests) a lo largo del curso. E03. Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura. E04. Discusión en tutorías y seminarios sobre los ejercicios, trabajos o prácticas realizadas en la asignatura. E05. Evaluación continua del alumno mediante preguntas y cuestiones orales durante el desarrollo de las prácticas E06. Realización y defensa de un informe sobre los casos prácticos planteados por el profesor en clase. E07. Realización de un examen escrito al final del curso E08. Realización de un examen de carácter práctico al final del curso. E10. Realización y defensa pública y oral ante un tribunal evaluador del informe escrito sobre el trabajo de investigación original realizado por el estudiante. E11. Examen parcial.</p>
Recomendaciones para la evaluación.
Recomendaciones para la recuperación.

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

Código		Plan		ECTS	5.0
Carácter	Obligatoria	Curso	1.º	Periodicidad	
Área					
Departamento					
Plataforma Virtual	Plataforma:				
	URL de Acceso:				

Datos del profesorado

Profesor Coordinador	Por determinar (consultar http://www.emtccm.org/)	Grupo / s	
Departamento			
Área			
Centro			
Despacho			
Horario de tutorías			
URL Web			
E-mail		Teléfono	

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

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

Perfil profesional.

Académico e investigador.

3.- Recomendaciones previas

Haber cursado un Grado o Licenciatura en Química o titulación equivalente.

4.- Objetivos de la asignatura

5.- Contenidos

- Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo.
- Dinámicas ab initio: Métodos basados en la ecuación de Ehrenfest, Born-Oppenheimer Molecular Dynamics, Carr-Parrinello Molecular Dynamics.
- Mecánica Molecular, fuerzas intermoleculares. campos de fuerza y estrategias de parametrización
- Métodos QM/MM
- Métodos de solvente: modelos discretos, continuos, mixtos.

6.- Competencias a adquirir

Específicas.

- El estudiante demuestra su conocimiento y comprensión de los hechos aplicando conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química Teórica y Modelización Computacional.
- Comprender los fundamentos teóricos y prácticos de técnicas con las que puede analizar la estructura electrónica, morfológica y estructural de un compuesto.
- El estudiante está familiarizado con los postulados fundamentales de la Mecánica Cuántica necesarios para un buen entendimiento de los métodos más comunes utilizados en química cuántica.
- El estudiante es capaz de discernir entre los diferentes métodos existentes y cómo seleccionar el más adecuado para cada problema.

Básicas/Generales.

- Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación
- Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio
- Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios
- Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones -y los conocimientos y razones últimas que las sustentan- a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades
- Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.
- Los estudiantes deben ser capaces de fomentar, en contextos académicos y profesionales, el avance tecnológico y científico dentro de una sociedad basada en el conocimiento y en el respeto a: a) los derechos fundamentales y de igualdad de oportunidades entre hombres y mujeres, b) los principios de igualdad de oportunidades y accesibilidad universal de las personas con discapacidad y c) los valores propios de una cultura de paz y de valores democráticos.
- El estudiante es capaz de adaptarse a diferentes entornos culturales.
- El estudiante es capaz de resolver problemas y tomar decisiones.

Transversales.
7.- Metodologías docentes

Actividades teóricas (dirigidas por el profesor): Sesión magistral.

Actividades prácticas guiadas (dirigidas por el profesor): Seminarios.

Atención personalizada (dirigida por el profesor): Tutorías. Actividades de seguimiento on-line.

8.- Previsión de distribución de las metodologías docentes

	Horas dirigidas por el profesor		Horas de trabajo autónomo	HORAS TOTALES
	Horas presenciales.	Horas no presenciales.		
Sesiones magistrales	25		37	62

		Horas dirigidas por el profesor		Horas de trabajo autónomo	HORAS TOTALES
		Horas presenciales.	Horas no presenciales.		
Prácticas	- En aula				
	- En el laboratorio				
	- En aula de informática				
	- De campo				
	- De visualización (visu)				
Seminarios		20		30	50
Exposiciones y debates					
Tutorías		2		3	5
Actividades de seguimiento online					
Preparación de trabajos					
Otras actividades (detallar)					
Exámenes		3			3
TOTAL		50		70	120

9.- Recursos

Libros de consulta para el alumno
Otras referencias bibliográficas, electrónicas o cualquier otro tipo de recurso.

10.- Evaluación

Consideraciones Generales
Las calificaciones, de acuerdo con la legislación vigente, se realizan en una escala numérica de 0-10, con un decimal.

Criterios de evaluación
Convocatoria ordinaria. E03 60% E04 40%
Convocatoria extraordinaria E03 30% E07 70%
Instrumentos de evaluación
E01. Asistencia y participación en las clases magistrales. E02. Realización de controles (tests) a lo largo del curso. E03. Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura. E04. Discusión en tutorías y seminarios sobre los ejercicios, trabajos o prácticas realizadas en la asignatura. E05. Evaluación continua del alumno mediante preguntas y cuestiones orales durante el desarrollo de las prácticas E06. Realización y defensa de un informe sobre los casos prácticos planteados por el profesor en clase. E07. Realización de un examen escrito al final del curso E08. Realización de un examen de carácter práctico al final del curso. E10. Realización y defensa pública y oral ante un tribunal evaluador del informe escrito sobre el trabajo de investigación original realizado por el estudiante. E11. Examen parcial.
Recomendaciones para la evaluación.
Recomendaciones para la recuperación.

NIVELACIÓN EN FÍSICA

1.- Datos de la Asignatura

Código		Plan		ECTS	5.0
Carácter	Opta	Curso	1.º	Periodicidad	
Área	Química Física				
Departamento	Química Física				
Plataforma Virtual	Plataforma:				
	URL de Acceso:				

Datos del profesorado

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

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

Bloque formativo al que pertenece la materia

Complementos Formativos

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

Esta asignatura ha sido diseñada para aquellos estudiantes provenientes de grados afines al de Química, que requieran mejorar su base en química.

Perfil profesional.

Académico e investigador.

3.- Recomendaciones previas

Haber cursado un Grado o Licenciatura en Química o titulación equivalente.

4.- Objetivos de la asignatura

Se busca que esta asignatura garantice un nivel homogéneo entre los estudiantes que siguen el Máster.

5.- Contenidos

TEMA I: MOMENTO ANGULAR

Momento angular y rotaciones: reglas de conmutación. Teoría general del momento angular y base estándar. Operadores escalares y vectoriales. Momento angular orbital: armónicos esféricos. Suma de momentos angulares: casos simples.

TEMA II: POTENCIALES CENTRALES. ÁTOMO DE HIDRÓGENO

Fuerzas centrales: conservación del momento angular y ecuación de Schrödinger para la parte radial. Potencial Coulombiano y átomo de Hidrógeno. Densidades de carga y corriente de orbitales hidrogenoides. Oscilador armónico isótropo.

TEMA III: EL ESPÍN

Descripción no relativista de una partícula de espín $\frac{1}{2}$. Matrices de Pauli y espinores. El espín del electrón: momento magnético y manifestaciones físicas.

TEMA IV: IDENTIDAD DE PARTÍCULAS

Partículas indistinguibles en el ámbito cuántico. Fermiones y bosones. Principio de exclusión de Pauli: átomos plurieléctricos y Tabla Periódica.

TEMA V: MÉTODOS APROXIMADOS

Teoría de perturbaciones estacionarias. Estructura fina del átomo de Hidrógeno. Perturbaciones dependientes del tiempo: regla de oro de Fermi. Nociones sobre el método variacional.

6.- Competencias a adquirir

Específicas.
Básicas/Generales.
<ul style="list-style-type: none"> - Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación. - Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo. - El estudiante es capaz de resolver problemas y tomar decisiones. - El estudiante es capaz de trabajar en equipo tanto a nivel multidisciplinar como con sus propios pares.
Transversales.

7.- Metodologías docentes

Actividades teóricas (dirigidas por el profesor): Sesión magistral.
 Actividades prácticas guiadas (dirigidas por el profesor): Seminarios.
 Atención personalizada (dirigida por el profesor): Tutorías.

8.- Previsión de distribución de las metodologías docentes

		Horas dirigidas por el profesor		Horas de trabajo autónomo	HORAS TOTALES
		Horas presenciales.	Horas no presenciales.		
Sesiones magistrales		30		45	75
Prácticas	- En aula				
	- En el laboratorio				
	- En aula de informática				
	- De campo				
	- De visualización (visu)				

	Horas dirigidas por el profesor		Horas de trabajo autónomo	HORAS TOTALES
	Horas presenciales.	Horas no presenciales.		
Seminarios	15		23	38
Exposiciones y debates				
Tutorías				
Actividades de seguimiento online				
Preparación de trabajos				
Otras actividades (detallar)				
Exámenes	5		7	12
TOTAL	50		75	125

9.- Recursos

Libros de consulta para el alumno

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

10.- Evaluación

Consideraciones Generales

Las calificaciones, de acuerdo con la legislación vigente, se realizan en una escala numérica de 0-10, con un decimal.

Criterios de evaluación

Convocatoria ordinaria.

E02 30%

E10 40%

E04 30%

Convocatoria extraordinaria

E04 30%

E07 70%

Instrumentos de evaluación
<p>E01. Asistencia y participación en las clases magistrales.</p> <p>E02. Realización de controles (tests) a lo largo del curso.</p> <p>E03. Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura.</p> <p>E04. Discusión en tutorías y seminarios sobre los ejercicios, trabajos o prácticas realizadas en la asignatura.</p> <p>E05. Evaluación continua del alumno mediante preguntas y cuestiones orales durante el desarrollo de las prácticas</p> <p>E06. Realización y defensa de un informe sobre los casos prácticos planteados por el profesor en clase.</p> <p>E07. Realización de un examen escrito al final del curso</p> <p>E08. Realización de un examen de carácter práctico al final del curso.</p>
Recomendaciones para la evaluación.
Recomendaciones para la recuperación.

NIVELACIÓN EN MATEMÁTICAS
1.- Datos de la Asignatura

Código		Plan		ECTS	5.0
Carácter	Optativa	Curso	1.º	Periodicidad	
Área	Química Física				
Departamento	Química Física				
Plataforma Virtual	Plataforma:				
	URL de Acceso:				

Datos del profesorado

Profesor Coordinador	Susana Gómez Carrasco	Grupo / s	
Departamento	Química Física		
Área	Química Física		
Centro	Facultad de Ciencias Químicas		
Despacho	C3511		
Horario de tutorías	A decidir en función de horarios		
URL Web			
E-mail	susana.gomez@usal.es	Teléfono	923294485

Profesor	Mª Dolores González Sánchez	Grupo / s	
Departamento	Química Física		
Área	Química Física		
Centro	Facultad de Ciencias Química		
Despacho	C3501		
Horario de tutorías	A decidir en función de horarios		

URL Web			
E-mail	lgonsan@usal.es	Teléfono	923294485

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

Bloque formativo al que pertenece la materia
Complementos Formativos
Papel de la asignatura dentro del Bloque formativo y del Plan de Estudios.
Esta asignatura ha sido diseñada para aquellos estudiantes provenientes de grados afines al de Química, que requieran mejorar su base en química.
Perfil profesional.
Académico e investigador.

3.- Recomendaciones previas

Haber cursado un Grado o Licenciatura en Química o titulación equivalente.
--

4.- Objetivos de la asignatura

Se busca que esta asignatura garantice un nivel homogéneo entre los estudiantes que siguen el Máster.

5.- Contenidos

<ol style="list-style-type: none"> 1. MATRICES Y SISTEMAS LINEALES 2. ESPACIOS VECTORIALES 3. APLICACIONES LINEALES 4. DETERMINANTES 5. ESTRUCTURA DE LOS ENDOMORFISMOS 6. DUALIDAD 7. TEMAS ADICIONALES: álgebra lineal sobre cuerpos finitos, espacios lineales de dimensión infinita.

6.- Competencias a adquirir

Específicas.

Básicas/Generales.

- Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación.
- Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.
- El estudiante es capaz de resolver problemas y tomar decisiones.
- El estudiante es capaz de trabajar en equipo tanto a nivel multidisciplinar como con sus propios pares.

Transversales.

7.- Metodologías docentes

Actividades teóricas (dirigidas por el profesor): Sesión magistral.
 Actividades prácticas guiadas (dirigidas por el profesor): Seminarios.
 Atención personalizada (dirigida por el profesor): Tutorías.

8.- Previsión de distribución de las metodologías docentes

	Horas dirigidas por el profesor		Horas de trabajo autónomo	HORAS TOTALES
	Horas presenciales.	Horas no presenciales.		
Sesiones magistrales	30		45	75
Prácticas	- En aula			
	- En el laboratorio			
	- En aula de informática			
	- De campo			
	- De visualización (visu)			

	Horas dirigidas por el profesor		Horas de trabajo autónomo	HORAS TOTALES
	Horas presenciales.	Horas no presenciales.		
Seminarios	15		23	38
Exposiciones y debates				
Tutorías	5		7	12
Actividades de seguimiento online				
Preparación de trabajos				
Otras actividades (detallar)	50		75	125
Exámenes	4		6	10
TOTAL	50		68	118

9.- Recursos

Libros de consulta para el alumno
Otras referencias bibliográficas, electrónicas o cualquier otro tipo de recurso.

10.- Evaluación

Consideraciones Generales
Las calificaciones, de acuerdo con la legislación vigente, se realizan en una escala numérica de 0-10, con un decimal.
Criterios de evaluación
<p>Convocatoria ordinaria. E02 15% E05 15% E07 70%</p> <p>Convocatoria extraordinaria E02 15%</p>

E05 15%

E07 70%

Instrumentos de evaluación

E01. Asistencia y participación en las clases magistrales.

E02. Realización de controles (tests) a lo largo del curso.

E03. Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura.

E04. Discusión en tutorías y seminarios sobre los ejercicios, trabajos o prácticas realizadas en la asignatura.

E05. Evaluación continua del alumno mediante preguntas y cuestiones orales durante el desarrollo de las prácticas

E06. Realización y defensa de un informe sobre los casos prácticos planteados por el profesor en clase.

E07. Realización de un examen escrito al final del curso

E08. Realización de un examen de carácter práctico al final del curso.

Recomendaciones para la evaluación.

Recomendaciones para la recuperación.

NIVELACIÓN EN QUÍMICA

1.- Datos de la Asignatura

Código		Plan		ECTS	5.0
Carácter	Optativa	Curso	1.º	Periodicidad	
Área	Química Física				
Departamento	Química Física				
Plataforma Virtual	Plataforma:				
	URL de Acceso:				

Datos del profesorado

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

Profesor	Susana Gómez Carrasco	Grupo / s	
Departamento	Química Física		
Área	Química Física		
Centro	Facultad de Ciencias Química		
Despacho	C3511		
Horario de tutorías	A decidir en función de horarios		

URL Web			
E-mail	susana.gomez@usal.es	Teléfono	923294485

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

Bloque formativo al que pertenece la materia

Complementos Formativos

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

Esta asignatura ha sido diseñada para aquellos estudiantes provenientes de grados afines al de Química, que requieran mejorar su base en química.

Perfil profesional.

Académico e investigador.

3.- Recomendaciones previas

Haber cursado un Grado o Licenciatura en Química o titulación equivalente.

4.- Objetivos de la asignatura

Se busca que esta asignatura garantice un nivel homogéneo entre los estudiantes que siguen el Máster.

5.- Contenidos

- 1.- FUNDAMENTOS DE QUÍMICA CUÁNTICA
 - Antecedentes de la Mecánica Cuántica
 - Introducción a la Mecánica Cuántica.
 - Átomos
 - Moléculas y Enlace Químico
 - Interacción Radiación-Materia
2. ESPECTROSCOPIA MOLECULAR
 - Moléculas Diatómicas

- Moléculas Poliatómicas
- Espectroscopías de Resonancia Magnética.

3. TERMODINÁMICA ESTADÍSTICA

- Termodinámica Estadística
- Funciones de Partición.

4. MACROMOLECULAS

PROGRAMA DE PRÁCTICAS.

- 1.- Resolución de sistemas modelo: Pozos de potencial, barreras y efecto túnel.
- 2.- Espectros atómicos.
- 3.- Curvas de energía potencial para moléculas diatómicas.
- 4.- Cálculo de superficies de energía potencial.
- 5.- Teoría de orbitales moleculares en moléculas poliatómicas.
- 6.- Espectros UV de moléculas conjugadas.
- 7.- Fotofísica.
- 8.- Espectroscopía de infrarrojo y Raman.
- 9.- Simulación de Espectros NMR y ESR.
- 10.- Determinación de pesos moleculares de polímeros.

6.- Competencias a adquirir

Específicas.

Básicas/Generales.

- Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación.
- Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.
- El estudiante es capaz de resolver problemas y tomar decisiones.
- El estudiante es capaz de trabajar en equipo tanto a nivel multidisciplinar como con sus propios pares.

Transversales.

7.- Metodologías docentes

Actividades teóricas (dirigidas por el profesor): Sesión magistral.

Actividades prácticas guiadas (dirigidas por el profesor): Seminarios. Prácticas en laboratorios.

Atención personalizada (dirigida por el profesor): Tutorías.

8.- Previsión de distribución de las metodologías docentes

	Horas dirigidas por el profesor		Horas de trabajo autónomo	HORAS TOTALES
	Horas presenciales.	Horas no presenciales.		
Sesiones magistrales	20		35	55
Prácticas	- En aula			
	- En el laboratorio	8	6	14
	- En aula de informática	8	6	14
	- De campo			
	- De visualización (visu)			
Seminarios	10		15	25
Exposiciones y debates				
Tutorías				
Actividades de seguimiento online				
Preparación de trabajos				
Otras actividades (detallar)				
Exámenes	4		6	10
TOTAL	50		68	118

9.- Recursos

Libros de consulta para el alumno

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

10.- Evaluación

Consideraciones Generales
Las calificaciones, de acuerdo con la legislación vigente, se realizan en una escala numérica de 0-10, con un decimal.
Criterios de evaluación
<p>Convocatoria ordinaria. E04 15% E03 25% E02 15% E11 23% E07 22%</p> <p>Convocatoria extraordinaria E07 70% E03 25% E04 5%</p>
Instrumentos de evaluación
E01. Asistencia y participación en las clases magistrales. E02. Realización de controles (tests) a lo largo del curso. E03. Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura. E04. Discusión en tutorías y seminarios sobre los ejercicios, trabajos o prácticas realizadas en la asignatura. E05. Evaluación continua del alumno mediante preguntas y cuestiones orales durante el desarrollo de las prácticas E06. Realización y defensa de un informe sobre los casos prácticos planteados por el profesor en clase. E07. Realización de un examen escrito al final del curso E08. Realización de un examen de carácter práctico al final del curso.
Recomendaciones para la evaluación.
Recomendaciones para la recuperación.

PROFUNDIZACIÓN EN LOS MÉTODOS DE LA QUÍMICA TEÓRICA
1.- Datos de la Asignatura

Código		Plan		ECTS	5.0
Carácter	Obligatoria	Curso	1.º	Periodicidad	
Área					
Departamento					
Plataforma Virtual	Plataforma:				
	URL de Acceso:				

Datos del profesorado

Profesor Coordinador	Por determinar (consultar http://www.emtccm.org/)	Grupo / s	
Departamento			
Área			
Centro			
Despacho			
Horario de tutorías			
URL Web			
E-mail		Teléfono	

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

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

Perfil profesional.

Académico e investigador.

3.- Recomendaciones previas

Haber cursado un Grado o Licenciatura en Química o titulación equivalente.

4.- Objetivos de la asignatura

5.- Contenidos

- Integrales moleculares. Propiedades y técnicas de cálculo.
- Ecuaciones SCF. Convergencia. Métodos de escalado lineal.
- Teoría de Perturbaciones. Convergencia de MPn. Diagramas. Teorema de linkedclusters.
- Métodos locales de correlación electrónica. Local Pair Natural Orbitals
- Combinación de Energías de Fragmentos Moleculares
- Eficiencia y escalado de los métodos. Coste computacional.
- Métodos explícitamente correlacionados.

6.- Competencias a adquirir

Específicas.

- El estudiante demuestra su conocimiento y comprensión de los hechos aplicando conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química Teórica y Modelización Computacional.
- Comprender los fundamentos teóricos y prácticos de técnicas con las que puede analizar la estructura electrónica, morfológica y estructural de un compuesto.
- El estudiante está familiarizado con los postulados fundamentales de la Mecánica Cuántica necesarios para un buen entendimiento de los métodos más comunes utilizados en química cuántica.
- El estudiante es capaz de discernir entre los diferentes métodos existentes y cómo seleccionar el más adecuado para cada problema.

Básicas/Generales.

- Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación
- Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio
- Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios
- Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones -y los conocimientos y razones últimas que las sustentan- a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades
- Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.
- Los estudiantes deben ser capaces de fomentar, en contextos académicos y profesionales, el avance tecnológico y científico dentro de una sociedad basada en el conocimiento y en el respeto a: a) los derechos fundamentales y de igualdad de oportunidades entre hombres y mujeres, b) los principios de igualdad de oportunidades y accesibilidad universal de las personas con discapacidad y c) los valores propios de una cultura de paz y de valores democráticos.
- El estudiante es capaz de adaptarse a diferentes entornos culturales.
- El estudiante es capaz de resolver problemas y tomar decisiones.

Transversales.
7.- Metodologías docentes

Actividades teóricas (dirigidas por el profesor): Sesión magistral.

Actividades prácticas guiadas (dirigidas por el profesor): Prácticas en aulas informáticas. Seminarios.

Atención personalizada (dirigida por el profesor): Tutorías. Actividades de seguimiento on-line.

8.- Previsión de distribución de las metodologías docentes

	Horas dirigidas por el profesor		Horas de trabajo autónomo	HORAS TOTALES
	Horas presenciales.	Horas no presenciales.		
Sesiones magistrales	25		37	62

		Horas dirigidas por el profesor		Horas de trabajo autónomo	HORAS TOTALES
		Horas presenciales.	Horas no presenciales.		
Prácticas	- En aula				
	- En el laboratorio				
	- En aula de informática				
	- De campo				
	- De visualización (visu)				
Seminarios		20		30	50
Exposiciones y debates					
Tutorías		2		3	5
Actividades de seguimiento online					
Preparación de trabajos					
Otras actividades (detallar)					
Exámenes		3			3
TOTAL		50		70	120

9.- Recursos

Libros de consulta para el alumno
Otras referencias bibliográficas, electrónicas o cualquier otro tipo de recurso.

10.- Evaluación

Consideraciones Generales
Las calificaciones, de acuerdo con la legislación vigente, se realizan en una escala numérica de 0-10, con un decimal.

Criterios de evaluación
Convocatoria ordinaria. E03 60% E04 40%
Convocatoria extraordinaria E03 30% E07 70%
Instrumentos de evaluación
E01. Asistencia y participación en las clases magistrales. E02. Realización de controles (tests) a lo largo del curso. E03. Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura. E04. Discusión en tutorías y seminarios sobre los ejercicios, trabajos o prácticas realizadas en la asignatura. E05. Evaluación continua del alumno mediante preguntas y cuestiones orales durante el desarrollo de las prácticas E06. Realización y defensa de un informe sobre los casos prácticos planteados por el profesor en clase. E07. Realización de un examen escrito al final del curso E08. Realización de un examen de carácter práctico al final del curso. E10. Realización y defensa pública y oral ante un tribunal evaluador del informe escrito sobre el trabajo de investigación original realizado por el estudiante. E11. Examen parcial.
Recomendaciones para la evaluación.
Recomendaciones para la recuperación.

SIMETRÍA EN ÁTOMOS, MOLÉCULAS Y SÓLIDOS

1.- Datos de la Asignatura

Código		Plan		ECTS	5.0
Carácter	Obligatoria	Curso	1.º	Periodicidad	
Área					
Departamento					
Plataforma Virtual	Plataforma:				
	URL de Acceso:				

Datos del profesorado

Profesor Coordinador	Por determinar (consultar http://www.emtccm.org)	Grupo / s	
Departamento			
Área			
Centro			
Despacho			
Horario de tutorías			
URL Web			
E-mail		Teléfono	

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

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

Perfil profesional.

Académico e investigador.

3.- Recomendaciones previas

Haber cursado un Grado o Licenciatura en Química o titulación equivalente.

4.- Objetivos de la asignatura

5.- Contenidos

1. Aplicaciones de la teoría de grupos a átomos.
2. Simetría en Moléculas:
Simetría: operaciones, grupos puntuales, representación matricial
Aplicaciones de la simetría en Química Cuántica.
3. Simetría en Sólidos:
Simetrías espaciales
Estructuras isotrópicas y anisotrópicas
Red recíproca de una red de Bravais.

6.- Competencias a adquirir

Específicas.

- El estudiante posee la base matemática necesaria para el correcto tratamiento de la simetría en átomos, moléculas y sólidos, con énfasis en las posibles aplicaciones.
- El estudiante comprende y maneja las herramientas matemáticas requeridas para el desarrollo de la Química Teórica en sus aspectos fundamentales y sus aplicaciones.

Básicas/Generales.

- Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación
- Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio
- Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios
- Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones -y los conocimientos y razones últimas que las sustentan- a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades
- Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.
- Los estudiantes deben ser capaces de fomentar, en contextos académicos y profesionales, el avance tecnológico y científico dentro de una sociedad basada en el conocimiento y en el respeto a: a) los derechos fundamentales y de igualdad de oportunidades entre hombres y mujeres, b) los principios de igualdad de oportunidades y accesibilidad universal de las personas con discapacidad y c) los valores propios de una cultura de paz y de valores democráticos.
- El estudiante es capaz de adaptarse a diferentes entornos culturales.
- El estudiante es capaz de resolver problemas y tomar decisiones.

Transversales.

7.- Metodologías docentes

Actividades teóricas (dirigidas por el profesor): Sesión magistral.

Actividades prácticas guiadas (dirigidas por el profesor): Seminarios.

Atención personalizada (dirigida por el profesor): Tutorías. Actividades de seguimiento on-line.

8.- Previsión de distribución de las metodologías docentes

	Horas dirigidas por el profesor		Horas de trabajo autónomo	HORAS TOTALES
	Horas presenciales.	Horas no presenciales.		
Sesiones magistrales	20		30	50

		Horas dirigidas por el profesor		Horas de trabajo autónomo	HORAS TOTALES
		Horas presenciales.	Horas no presenciales.		
Prácticas	- En aula				
	- En el laboratorio				
	- En aula de informática				
	- De campo				
	- De visualización (visu)				
Seminarios		20		30	50
Exposiciones y debates					
Tutorías		5		7	12
Actividades de seguimiento online					
Preparación de trabajos					
Otras actividades (detallar)					
Exámenes		5			5
TOTAL		50		67	117

9.- Recursos

Libros de consulta para el alumno

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

10.- Evaluación

Consideraciones Generales

Las calificaciones, de acuerdo con la legislación vigente, se realizan en una escala numérica de 0-10, con un decimal.

Criterios de evaluación
<p>Convocatoria ordinaria. E03 60% E04 40%</p> <p>Convocatoria extraordinaria E03 30% E07 70%</p>
Instrumentos de evaluación
<p>E01. Asistencia y participación en las clases magistrales. E02. Realización de controles (tests) a lo largo del curso. E03. Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura. E04. Discusión en tutorías y seminarios sobre los ejercicios, trabajos o prácticas realizadas en la asignatura. E05. Evaluación continua del alumno mediante preguntas y cuestiones orales durante el desarrollo de las prácticas E06. Realización y defensa de un informe sobre los casos prácticos planteados por el profesor en clase. E07. Realización de un examen escrito al final del curso E08. Realización de un examen de carácter práctico al final del curso. E10. Realización y defensa pública y oral ante un tribunal evaluador del informe escrito sobre el trabajo de investigación original realizado por el estudiante. E11. Examen parcial.</p>
Recomendaciones para la evaluación.
Recomendaciones para la recuperación.

SÓLIDOS

1.- Datos de la Asignatura

Código		Plan		ECTS	5.0
Carácter	Obligatoria	Curso	1.º	Periodicidad	
Área					
Departamento					
Plataforma Virtual	Plataforma:				
	URL de Acceso:				

Datos del profesorado

Profesor Coordinador	Por determinar (consultar http://www.emtccm.org/)	Grupo / s	
Departamento			
Área			
Centro			
Despacho			
Horario de tutorías			
URL Web			
E-mail		Teléfono	

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

Bloque formativo al que pertenece la materia

Módulo 3. Optatividad

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

Perfil profesional.

Académico e investigador.

3.- Recomendaciones previas

Haber cursado un Grado o Licenciatura en Química o titulación equivalente.

4.- Objetivos de la asignatura

5.- Contenidos

1. Theoretical Models

- Theoretical Models in Surface and Materials Science
- The Cluster Model
- Periodic Models
- Case studies: adsorption in metal oxides and nitrides

2. Solids

- Geometry and symmetry of crystals
- Thermodynamic properties of a pure crystal
- The free electron model
- Tight-binding methods
- General electronic structure methods

3. Applications

- Ab initio calculation of the electronic structure of solids.
- Ab initio simulation of magnetic and optical properties of impurities and structural instabilities of solids
- Molecular dynamics : Car Parrinello
- Ab initio simulation of the structure, thermodynamic properties and reactivity in surfaces.
- Hot topics in solid state chemistry

6.- Competencias a adquirir

Específicas.

- Adquirir 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
- Comprender los fundamentos teóricos y prácticos de técnicas con las que puede analizar la estructura electrónica, morfológica y estructural de un compuesto.
- El estudiante debe ser capaz de desenvolverse oralmente, en una lengua extranjera, en diferentes contextos de la vida cotidiana.
- Proporcionar al alumno la metodología básica para el tratamiento de sistemas periódicos, cristales y polímeros.

Básicas/Generales.

- Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación
- Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio
- Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones -y los conocimientos y razones últimas que las sustentan- a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades
- Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.
- Los estudiantes deben ser capaces de fomentar, en contextos académicos y profesionales, el avance tecnológico y científico dentro de una sociedad basada en el conocimiento y en el respeto a: a) los derechos fundamentales y de igualdad de oportunidades entre hombres y mujeres, b) los principios de igualdad de oportunidades y accesibilidad universal de las personas con discapacidad y c) los valores propios de una cultura de paz y de valores democráticos.
- El estudiante es capaz de adaptarse a diferentes entornos culturales.
- El estudiante es capaz de resolver problemas y tomar decisiones.

Transversales.

7.- Metodologías docentes

Actividades teóricas (dirigidas por el profesor): Sesión magistral.

Actividades prácticas guiadas (dirigidas por el profesor): Seminarios.

Atención personalizada (dirigida por el profesor): Tutorías. Actividades de seguimiento on-line.

8.- Previsión de distribución de las metodologías docentes

		Horas dirigidas por el profesor		Horas de trabajo autónomo	HORAS TOTALES
		Horas presenciales.	Horas no presenciales.		
Sesiones magistrales		25		37	62
Prácticas	- En aula				
	- En el laboratorio				
	- En aula de informática				
	- De campo				
	- De visualización (visu)				
Seminarios		20		30	50
Exposiciones y debates					
Tutorías		2		3	5
Actividades de seguimiento online					
Preparación de trabajos					
Otras actividades (detallar)					
Exámenes		3			3
TOTAL		50		70	120

9.- Recursos

Libros de consulta para el alumno
Otras referencias bibliográficas, electrónicas o cualquier otro tipo de recurso.

10.- Evaluación

Consideraciones Generales
Las calificaciones, de acuerdo con la legislación vigente, se realizan en una escala numérica de 0-10, con un decimal.

Criterios de evaluación
Convocatoria ordinaria. E03 60% E04 40%
Convocatoria extraordinaria E03 30% E07 70%
Instrumentos de evaluación
E01. Asistencia y participación en las clases magistrales. E02. Realización de controles (tests) a lo largo del curso. E03. Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura. E04. Discusión en tutorías y seminarios sobre los ejercicios, trabajos o prácticas realizadas en la asignatura. E05. Evaluación continua del alumno mediante preguntas y cuestiones orales durante el desarrollo de las prácticas E06. Realización y defensa de un informe sobre los casos prácticos planteados por el profesor en clase. E07. Realización de un examen escrito al final del curso E08. Realización de un examen de carácter práctico al final del curso. E10. Realización y defensa pública y oral ante un tribunal evaluador del informe escrito sobre el trabajo de investigación original realizado por el estudiante. E11. Examen parcial.
Recomendaciones para la evaluación.
Recomendaciones para la recuperación.

TÉCNICAS COMPUTACIONALES Y CÁLCULO NUMÉRICO

1.- Datos de la Asignatura

Código		Plan		ECTS	5.0
Carácter	Obligatoria	Curso	1.º	Periodicidad	
Área					
Departamento					
Plataforma Virtual	Plataforma:				
	URL de Acceso:				

Datos del profesorado

Profesor Coordinador	Por determinar (consultar http://www.emtccm.org)	Grupo / s	
Departamento			
Área			
Centro			
Despacho			
Horario de tutorías			
URL Web			
E-mail		Teléfono	

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

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

Perfil profesional.

Académico e investigador.

3.- Recomendaciones previas

Haber cursado un Grado o Licenciatura en Química o titulación equivalente.

4.- Objetivos de la asignatura

--

5.- Contenidos

1. Algoritmos y Programación.
2. Programación FORTRAN.
3. Cálculo matricial.
4. Cálculo Integral.
5. Búsqueda de ceros y optimización de funciones.
6. Análisis multivariante.

6.- Competencias a adquirir

Específicas.

- Conocer, manejar e interpretar las técnicas computacionales más comunes empleadas en la resolución de problemas químicos.
- 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.
- El estudiante es capaz de desarrollar programas eficientes en Fortran con el fin de utilizar dichas herramientas en su trabajo cotidiano.

Básicas/Generales.

- Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación
- Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio
- Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios
- Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones -y los conocimientos y razones últimas que las sustentan- a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades
- Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.
- Los estudiantes deben ser capaces de fomentar, en contextos académicos y profesionales, el avance tecnológico y científico dentro de una sociedad basada en el conocimiento y en el respeto a: a) los derechos fundamentales y de igualdad de oportunidades entre hombres y mujeres, b) los principios de igualdad de oportunidades y accesibilidad universal de las personas con discapacidad y c) los valores propios de una cultura de paz y de valores democráticos.
- El estudiante es capaz de adaptarse a diferentes entornos culturales.
- El estudiante es capaz de resolver problemas y tomar decisiones.
- El estudiante posee capacidad de análisis y síntesis.

Transversales.**7.- Metodologías docentes**

Actividades teóricas (dirigidas por el profesor): Sesión magistral.

Actividades prácticas guiadas (dirigidas por el profesor): Prácticas en aulas informáticas. Seminarios.

Atención personalizada (dirigida por el profesor): Tutorías. Actividades de seguimiento on-line.

8.- Previsión de distribución de las metodologías docentes

		Horas dirigidas por el profesor		Horas de trabajo autónomo	HORAS TOTALES
		Horas presenciales.	Horas no presenciales.		
Sesiones magistrales		20		30	50
Prácticas	- En aula				
	- En el laboratorio				
	- En aula de informática	18		14	32
	- De campo				
	- De visualización (visu)				
Seminarios		7		11	18
Exposiciones y debates					
Tutorías		2		3	5
Actividades de seguimiento online					
Preparación de trabajos					
Otras actividades (detallar)					
Exámenes		3			3
TOTAL		50		58	108

9.- Recursos

Libros de consulta para el alumno

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

10.- Evaluación

Consideraciones Generales

Las calificaciones, de acuerdo con la legislación vigente, se realizan en una escala numérica de 0-10, con un decimal.

Criterios de evaluación
<p>Convocatoria ordinaria. E03 60% E04 40%</p> <p>Convocatoria extraordinaria E03 30% E07 70%</p>
Instrumentos de evaluación
<p>E01. Asistencia y participación en las clases magistrales. E02. Realización de controles (tests) a lo largo del curso. E03. Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura. E04. Discusión en tutorías y seminarios sobre los ejercicios, trabajos o prácticas realizadas en la asignatura. E05. Evaluación continua del alumno mediante preguntas y cuestiones orales durante el desarrollo de las prácticas E06. Realización y defensa de un informe sobre los casos prácticos planteados por el profesor en clase. E07. Realización de un examen escrito al final del curso E08. Realización de un examen de carácter práctico al final del curso. E10. Realización y defensa pública y oral ante un tribunal evaluador del informe escrito sobre el trabajo de investigación original realizado por el estudiante. E11. Examen parcial.</p>
Recomendaciones para la evaluación.
Recomendaciones para la recuperación.

