



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

ASIGNATURA / COURSE TITLE

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

1.1. Código / Course number

32531 / 303155 (USAL)

1.2. Materia / Content area

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

1.3. Tipo / Course type

Optativa / [Elective subject](#)

1.4. Nivel / Course level

Master / [Master](#)

1.5. Curso / Year

1º / 1st

1.6. Semestre / Semester

Anual / [Annual](#)

1.7. Número de créditos / Credit allotment

5 créditos ECTS / [5 ECTS credits](#)

1.8. Requisitos previos / Prerequisites

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

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

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



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

1.10. Datos del equipo docente / Faculty data

Docente(s) / Lecturer(s): Jesús Aldegunde Carrión
Departamento de Química / Department of Physical Chemistry
Facultad de Ciencias / Faculty of Chemical Sciences
Universidad de Salamanca
Despacho - Módulo / Office - Module: despacho C3503
Teléfono / Phone: 923 294 485
Correo electrónico/Email: jalde@usal.es
Página web/Website:
Horario de atención al alumnado/Office hours: concertar cita por correo electrónico

Docente(s) / Lecturer(s): M^a Dolores González Sánchez
Departamento de Química / Department of Physical Chemistry
Facultad de Ciencias / Faculty of Chemical Sciences
Universidad de Salamanca
Despacho - Módulo / Office - Module: despacho C3501
Teléfono / Phone: 923 294 485
Correo electrónico/Email: lgonsan@usal.es
Página web/Website:
Horario de atención al alumnado/Office hours: concertar cita por correo electrónico

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

Docente(s) / Lecturer(s): Inés Corral
Departamento de Química / Department of Chemistry
Facultad de Ciencias / Faculty of Sciences
Universidad Autónoma de Madrid
Despacho - Módulo / Office - Module: 307A
Teléfono / Phone: 91 497 8471
Correo electrónico/Email: ines.corral@uam.es
Página web/Website:
<http://web.uam.es/departamentos/ciencias/quimica/estruct/ines/index.html>
Horario de atención al alumnado/Office hours: concertar cita por correo electrónico

Docente(s) / Lecturer(s): Cristina Díaz Blanco
Departamento de Química / Department of Chemistry



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

Facultad de Ciencias / [Faculty of Sciences](#)
Universidad Autónoma de Madrid
Despacho - Módulo / [Office - Module](#): 305A
Teléfono / [Phone](#): 91 497 5620
Correo electrónico/[Email](#): cristina.diaz@uam.es
Página web/[Website](#): <http://web.uam.es/departamentos/ciencias/quimica/cristina/>
Horario de atención al alumnado/[Office hours](#): concertar cita por correo electrónico

Docente(s) / [Lecturer\(s\)](#): Paula Rivière
Departamento de Química / [Department of Chemistry](#)
Facultad de Ciencias / [Faculty of Sciences](#)
Universidad Autónoma de Madrid
Despacho - Módulo / [Office - Module](#): despacho 302, módulo 13
Teléfono / [Phone](#): 91 497 3861
Correo electrónico/[Email](#): paula.riviere@uam.es
Página web/[Website](#): http://campusys.qui.uam.es/?page_id=123
Horario de atención al alumnado/[Office hours](#): concertar cita por correo electrónico

Docente(s) / [Lecturer\(s\)](#): Sergio Díaz Tendero Victoria
Departamento de Química / [Department of Chemistry](#)
Facultad de Ciencias / [Faculty of Sciences](#)
Universidad Autónoma de Madrid
Despacho - Módulo / [Office - Module](#): despacho 305-C, módulo 13
Teléfono / [Phone](#): 91 497 6831
Correo electrónico/[Email](#): sergio.diaztendero@uam.es
Página web/[Website](#):
<http://web.uam.es/departamentos/ciencias/quimica/spline/sergio/index.html>
Horario de atención al alumnado/[Office hours](#): concertar cita por correo electrónico

1.11. Objetivos del curso / [Course objectives](#)

1. Herramientas para el trabajo científico: búsqueda de bibliografía, redacción de informes científicos. Adquisición de conocimientos básicos en el uso de centros de cálculo disponibles (conexión, comandos útiles para trabajo en remoto, conexiones ssh, sftp, scp, etc). Trabajo práctico en uso de software científico general (scripts, makefiles, debuggers) y herramientas de visualización.
2. Introducción a algunos lenguajes de programación para tratamiento de ficheros y datos: C++, shell script, Fortran 90 y Python. Ejercicios teóricos y prácticos y ejecución de códigos a nivel elemental.
3. Introducción al uso de librerías matemáticas de álgebra lineal (nivel práctico elemental) y computación científica en entornos de programación en serie y en paralelo.
4. Toma de contacto con programas de cálculo dirigidos al estudio del estado fundamental y estados excitados.
5. Localización y análisis de información relevante acerca de la función de onda y otras propiedades moleculares a partir de la salida de estos programas.



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

- 6 Afianzar los conceptos de función de onda multiconfiguracional y correlación estática vs. correlación dinámica.
7. Familiarización con programas de visualización de orbitales moleculares.
8. Sistemas periódicos: Conceptos físicos básicos
9. Toma de contacto con programas de cálculo dirigidos al estudio de sistemas periódicos

1.12. Contenidos del programa / Course contents

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.

1. Introduction to scientific research: literature searches, presentation of scientific papers
2. Informatic Tools: accessing computer centers, visualization tools, graphing tools, math tools.
3. Regular programs in quantum chemistry calculation: Gaussian, Molcas, Molpro, etc..
4. Programs for calculating periodic systems: VASP, CRYSTAL, etc.

1.13. Referencias de consulta / Course bibliography

1. Consulta de documentación actualizada en línea en lenguajes de programación y aplicaciones:

Fortran, librerías algebra lineal: fortran90.org y www.netlib.org
Python: www.python.org
Entornos en paralelo: www.open-mpi.org y openmp.org

2. J. B. Foreman y E. Frisch, Exploring chemistry with Electronic Structure Methods. 2nd Edition. Gaussian, Inc. Pittsburgh, 1996.
3. MOLCAS v. 7.8 Users' manual, Lund University, 2012.
4. Charles Kittel Introduction to solid state physics
5. Neil W. Ashcroft and N. David Mermin Solid state physics



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

2. Métodos docentes / Teaching methodology

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

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

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

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

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

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

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

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

3. Tiempo de trabajo del estudiante / Student workload

Presencial:

Clases prácticas en aula virtual 40 horas





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

Tutorías..... 10 horas

No Presencial:

Estudio autónomo individual o en grupo..... 35 horas

Elaboración de una memoria con resultados experimentales obtenidos en las prácticas.....30 horas

Elaboración de una memoria con ejercicios planteados en clase..... 10 horas

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

Contact hours:

Practical lessons in virtual classroom 40 hours

Tutoring..... 10 hours

Independent study hours:

self-study or group study 35 hours

Elaboration of a memory based on the practical results..... 30 hours

Elaboration of a memory based on the exercises proposed in class..... 10 hours

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

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

Convocatoria ordinaria

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

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

- 60 % Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura,
- 40 % la discusión que sobre la misma se realice con el profesor en tutorías y seminarios.

Convocatoria extraordinaria



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

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

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

Ordinary assessment

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

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

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

Extraordinary assessment

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

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

5. Cronograma* / Course calendar

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

*Este cronograma tiene carácter orientativo

*This course calendar is orientative



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

ASIGNATURA / COURSE TITLE

Bioquímica Computacional / [Computational Biochemistry](#)

1.1. Código / Course number

32533 / 303157 (USAL)

1.2. Materia / Content area

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

1.3. Tipo / Course type

Optativa / [Elective subject](#)

1.4. Nivel / Course level

Master / [Master](#)

1.5. Curso / Year

1º / 1st

1.6. Semestre / Semester

Anual / [Annual](#)

1.7. Número de créditos / Credit allotment

5 créditos ECTS / [5 ECTS credits](#)

1.8. Requisitos previos / Prerequisites

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

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

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



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

1.10. Datos del equipo docente / Faculty data

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

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

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

1.11. Objetivos del curso / Course objectives

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

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



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

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

1. Introducción. Biomoléculas y sus propiedades. Bases de datos estructurales de biomoléculas. Relación estructura-energía: Modelización de biomoléculas.
 2. Superficies de energía potencial en biomoléculas. Fuerzas intermoleculares. Mecánica cuántica (QM). Mecánica molecular (MM): Campos de fuerzas. Modelos mixtos QM/MM. Modelos de grano grueso. Modelos de solvatación.
 3. Exploración conformacional. Minimización: Coordenada de reacción. Métodos de Dinámica Molecular y Monte Carlo. Métodos de predicción de estructura.
 4. Catálisis enzimática. Conceptos básicos en catálisis enzimática. Modelización de reactividad enzimática.
 5. Relaciones estructura-actividad. Descriptores moleculares. Relaciones cuantitativas estructura-actividad (QSAR).
 6. Interacciones proteína-ligando. Técnicas de docking. Cálculo de energías libres de unión. Interacciones radiación-materia.
-
1. Introduction. Biomolecules and their properties. Structural databases of biomolecules. Structure-energy relationship: Biomolecules modeling.
 2. Potential energy surfaces in biomolecules. Intermolecular forces. Quantum mechanics (QM). Molecular mechanics (MM): Force fields. Mixed QM/MM models. Coarse grain models. Solvation models.
 3. Conformational exploration. Minimization: Reaction coordinate. Molecular Dynamics and Monte Carlo methods. Structure prediction methods.
 4. Enzymatic catalysis. Basic concepts in enzymatic catalysis. Modeling enzymatic reactivity.
 5. Structure-activity relationships. Molecular descriptors. Quantitative structure-activity relationships (QSAR).
 6. Protein-ligand interaction. Docking techniques. Calculation of binding free energies. Radiation-matter interactions.



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

1.13. Referencias de consulta / Course bibliography

Molecular Modeling and Simulation: An Interdisciplinary Guide

Tamar Schlick

Springer

Understanding Molecular Simulation, Second Edition: From Algorithms to Applications

Daan Frenkel

Academic Press

Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models

Chris Cramer

Wiley

2. Métodos docentes / Teaching methodology

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

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

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

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

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

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



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

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

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

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

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

3. Tiempo de trabajo del estudiante / Student workload

Presencial:

Clases teóricas en aula / aula virtual	20 horas
Exámenes escritos.....	3 horas
Tutorías.....	7 horas
Clases prácticas en aula virtual	20 horas

No Presencial:

Elaboración de una memoria con resultados experimentales obtenidos en las prácticas.....	16 horas
Estudio autónomo individual o en grupo.....	59 horas

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

Contact hours:

Theoretical lessons in classroom / virtual classroom	20 hours
Exams.....	3 hours
Tutoring.....	7 hours
Practical lessons in virtual classroom	20 hours

Independent study hours:

Elaboration of a memory based on the practical results.....	16 hours
self-study or group study	59 hours



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

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

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

Convocatoria ordinaria

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

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

- 10 % la asistencia y participación en clase,
- 30 % los controles periódicos.
- 60% la defensa de un caso práctico

Convocatoria extraordinaria

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

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

Ordinary assessment

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

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

- 10% attendance and participation in class,
- 30% Tests
- 60% practical case study

Extraordinary assessment





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

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

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

5. Cronograma* / **Course calendar**

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

*Este cronograma tiene carácter orientativo

*This course calendar is orientative



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

ASIGNATURA / COURSE TITLE

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

1.1. Código / Course number

32526 / 303144 (USAL)

1.2. Materia / Content area

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

1.3. Tipo / Course type

Obligatoria / [Compulsory subject](#)

1.4. Nivel / Course level

Master / [Master](#)

1.5. Curso / Year

1º / [1st](#)

1.6. Semestre / Semester

Anual / [Anual](#)

1.7. Número de créditos / Credit allotment

5 créditos ECTS / [5 ECTS credits](#)

1.8. Requisitos previos / Prerequisites

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

1.9. Requisitos mínimos de asistencia a las sesiones presenciales / [Minimum attendance requirement](#)

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



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

1.10. Datos del equipo docente / Faculty data

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Alfredo Sánchez de Merás
Departamento de Química Física Aplicada/ **Department of Physical Chemistry**
Facultad de Ciencias / **Institute of Molecular Science**
Universidad de Valencia / **University of Valencia**
Despacho - Módulo / **Office - Module**:
Teléfono / **Phone**:
Correo electrónico/**Email**: sanchez@uv.es
Página web/**Website**:
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: contact by email

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Jon I Mujica
Facultad de Química / **Faculty of Chemistry**
Universidad del País Vasco/ **University of the Basque Country**
Despacho - Módulo / **Office - Module**:
Teléfono / **Phone**: +34 943015341
Correo electrónico/**Email**: joni.mujika_at_ehu.es
Página web/**Website**:http://www.ehu.eus/chemistry/theory/1_group/dr-joni-mujika/
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: contact by email

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Susana Gómez Carrasco
Departamento de Química Física Aplicada/ **Department of Applied Physical Chemistry**
Facultad de Ciencias / **Faculty of Sciences**
Universidad de Salamanca / **University of Salamanca**
Despacho - Módulo / **Office - Module**:
Teléfono / **Phone**: 00 34 923 29 44 85
Correo electrónico/**Email**: susana.gomez@usal.es
Página web/**Website**:
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: contact by email

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Jose Manuel Hermida Ramon
Departamento de Química Física / **Department of Physical Chemistry**
Facultad de Química / **Faculty of Chemistry**
Universidad de Vigo / **University of Vigo**
Despacho - Módulo / **Office - Module**:
Teléfono / **Phone**: 00 34 986 81 38 12
Correo electrónico/**Email**: jose_hermida@uvigo.es
Página web/**Website**:
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: contact by email

1.11. Objetivos del curso / Course objectives



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

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

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

1.12. Contenidos del programa / Course contents

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

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

1.13. Referencias de consulta / Course bibliography

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

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

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

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

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

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



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

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

2. Métodos docentes / Teaching methodology

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

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

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

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

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

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

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



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

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

3. Tiempo de trabajo del estudiante / Student workload

Presencial:

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

No Presencial:

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

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

Contact hours:

Theoretical lessons in classroom / virtual classroom	20 hours
Tutoring.....	8 hours
Seminar.....	7 hours

Independent study hours:

self-study or group study	40 hours
Preparation of seminars, assigned tasks and study.....	20 hours
Elaboration of a memory based on the exercises proposed in class....	30 hours

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

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

Convocatoria ordinaria

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



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

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

- 60 % Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura,
- 40 % la discusión que sobre la misma se realice con el profesor en tutorías y seminarios.

Convocatoria extraordinaria

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

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

Ordinary assessment

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

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

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

Extraordinary assessment

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

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

5. Cronograma* / Course calendar

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

*Este cronograma tiene carácter orientativo

*This course calendar is orientative





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

ASIGNATURA / COURSE TITLE

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

1.1. Código / Course number

32529 / 303147 (USAL)

1.2. Materia / Content area

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

1.3. Tipo / Course type

Optativa / [Elective subject](#)

1.4. Nivel / Course level

Master / [Master](#)

1.5. Curso / Year

1º / 1st

1.6. Semestre / Semester

2º / 2nd

1.7. Número de créditos / Credit allotment

5 créditos ECTS / [5 ECTS credits](#)

1.8. Requisitos previos / Prerequisites

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

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

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



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

1.10. Datos del equipo docente / Faculty data

Docente(s) / **Lecturer(s)**: M. Isabel Menéndez Rodríguez
Departamento de Química Física / [Department of Physical Chemistry](#)
Universidad de Oviedo / [Oviedo University](#)
Despacho - Módulo / **Office - Module**: 199-2
Correo electrónico/**Email**: Isabel@uniovi.es
Página web/**Website**: www.unioviedo.es/mrq
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: contact by email

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Paula Mori
Departamento de Química / [Department of Chemistry](#)
Universidad Autónoma de Madrid / [University Autonoma de Madrid](#)
Facultad de Ciencias / [Faculty of Sciences](#)
Despacho 502b Módulo 13 / [Office 502b- Module13](#)
Teléfono / **Phone**: +34 914974961
Correo electrónico/**Email**: paula.mori@uam.es
Página web/**Website**
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: contact by email

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

1.11. Objetivos del curso / Course objectives

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

- Conocimiento de la problemática específica de los métodos mecanocuánticos aplicados a sistemas de gran tamaño.
- comprensión y capacidad de discriminación entre distintos métodos analíticos útiles para resolver integrales moleculares monoeléctricas y bielectricas según la naturaleza de dichas integrales.
- Comprensión de las características esenciales de los métodos numéricos utilizados para resolver integrales moleculares. Como consecuencia,



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

capacidad para modificar parámetros propios de cada método para resolver problemas prácticos y para escoger el método más adecuado a un problema concreto.

- Conocimiento detallado de algunos métodos que aceleran el proceso de resolución de ecuaciones autoconsistentes.
- Conocimiento de los fundamentos de los métodos locales para evaluar la energía de correlación.
- Conocimiento detallado de las bases metodológicas de los métodos más comunes.
- Capacidad para estimar coste computacional y escalado
- Estimación de la magnitud de los errores asociados
- Capacidad para determinar su posibilidad de aplicación a un problema concreto.

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

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

1.12. Contenidos del programa / Course contents

- Integrales moleculares. Propiedades y técnicas de cálculo.
- Ecuaciones SCF. Convergencia. Métodos de escalado lineal.
- Métodos locales de correlación electrónica. Local Pair Natural Orbitals
- Teoría de Perturbaciones. Convergencia de MPn. Diagramas. Teorema de linked clusters.



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

- Métodos explícitamente correlacionados.
- Eficiencia y escalado de los métodos. Coste computacional.

1.13. Referencias de consulta / Course bibliography

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

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

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

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

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

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

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

2. Métodos docentes / Teaching methodology

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

Docencia en red. Se utilizará las distintas herramientas que ofrece la plataforma moodle (<http://www.uam.es/moodle>). Publicación de contenidos



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

de la asignatura, herramientas de trabajo en grupo: foros de discusión y wiki, correo electrónico

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

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

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

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

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

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

3. Tiempo de trabajo del estudiante / Student workload

Presencial:

Clases teóricas en aula / aula virtual 20 horas
Seminarios..... 15 horas

No Presencial:

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

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





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

Contact hours:

Theoretical lessons in classroom / virtual classroom 20 hours
Seminars..... 15 hours

Independent study hours:

self-study or group study 40 hours
Preparation of seminars, assigned tasks and study..... 20 hours
Elaboration of a memory based on the exercises proposed in class.... 30 hours

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

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

Convocatoria ordinaria

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

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

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

Convocatoria extraordinaria

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

- 100 % la realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura.



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

Ordinary assessment

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

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

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

Extraordinary assessment

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

- 100% from the individual work.

5. Cronograma* / Course calendar

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

*Este cronograma tiene carácter orientativo

*This course calendar is orientative



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

ASIGNATURA / COURSE TITLE

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

1.1. Código / Course number

30576 / 303148 (USAL)

1.2. Materia / Content area

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

1.3. Tipo / Course type

Optativa / [Elective subject](#)

1.4. Nivel / Course level

Master / [Master](#)

1.5. Curso / Year

1º / 1st

1.6. Semestre / Semester

2º / 2nd

1.7. Número de créditos / Credit allotment

5 créditos ECTS / [5 ECTS credits](#)

1.8. Requisitos previos / Prerequisites

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

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

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





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

1.10. Datos del equipo docente / Faculty data

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

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

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Pablo Gamallo
Departamento de Química Física/ [Department of Physical Chemistry](#)
Universidad de Barcelona / [University of Barcelona](#)
Correo electrónico/**Email**: gamallo@ub.edu
Página web/**Website**: <http://www.ub.edu/dept-qb/personal/pgamallo.html>
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: contact by email

1.11. Objetivos del curso / Course objectives

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

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

Chemical Reaction Dynamics is the area of science that links the macroscopic measurements performed in the reaction kinetics studies with the individual molecular collisions that are behind any chemical process. The goal of the present course is to provide to the students an overview of this



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

branch of the Chemical Physics. Special emphasis will be put on the following aspects of the subject:

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

1.12. Contenidos del programa / Course contents

- Definición y objeto de la Dinámica de Reacciones Químicas
- Tipos de colisiones. Análisis clásico.
- Scattering y potencial: caso elástico. Observables experimentales.
- Superficies de energía potencial. Colisiones elásticas, inelásticas y reactivas.
- Método de las trayectorias cuasiclásicas: aplicación a procesos en fase gas y de tipo gas-superficie.
- Dinámica cuántica con paquetes de ondas: visión general y aplicaciones a las reacciones químicas
- Cinética química. Teorías de velocidades de reacción: teoría de colisiones, teoría canónica del estado de transición y teoría variacional canónica del estado de transición. Correcciones del efecto túnel.
- Método de Monte Carlo cinético aplicado a procesos gas-superficie.
- Simulaciones de dinámica molecular clásica.

- Definition and goal of the Dynamics of Chemical Reactions.
- Types of collisions. Classical study.
- Scattering and potential: elastic collisions. Experimental observables.
- Potential energy surfaces. Elastic, inelastic and reactive collisions.
- Quasiclassical trajectory method: application to gas phase and to gas-surface processes.
- Wave-packet quantum dynamics: overview and applications to chemical reactions.
- Chemical kinetics. Chemical reaction theories: collision theory, canonical transition state theory and variational canonical transition state theory. Tunnelling corrections.
- Kinetic Monte Carlo method applied to gas-surface processes.
- Classical molecular dynamics simulations.



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

1.13. Referencias de consulta / Course bibliography

- 1.- “Molecular Reaction Dynamics”, Raphael D. Levine, Cambridge University Press, 2005.
- 2.- “Tutorials in Molecular Reaction Dynamics”, Mark Brouard and Claire Vallance, Royal Society of Chemistry, 2011.
- 3.- “Chemical kinetics”, Keith J. Laidler, Harper&Row, 1987.
- 4.- “Theory of Chemical Reaction Dynamics”, Michael Baer (Ed.), Vol IV, CRC Press (1985).
- 5.- “Dynamics of molecule surface interactions”, Gert D. Billing, John Wiley & Sons, 2000.
- 6.- “Dynamics of gas-surface interactions”, C.T. Rettner and M.N.R. Ashfold (Ed.), Royal Society of Chemistry, 1991.
- 7.- “First-principles kinetic Monte Carlo simulations for heterogeneous catalysis: concepts, status and frontiers”, Karsten Reuter, in “Modeling heterogeneous catalytic reaction: from the molecular process to the technical system”, O. Deutschmann (Ed.), Wiley-VCH, 2011.
- 8.- “An introduction to kinetic Monte Carlo simulations of surface reactions”, A.P.J. Jansen, Springer-Verlag, 2012.
- 9.- “Molecular collision theory”, M. S. Child, Academic Press, Inc., New York, 1974.
- 10.- “Understanding molecular simulation”, D. Frenkel and B. Smit, Academic Press, 2002.

2. Métodos docentes / Teaching methodology

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

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

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



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

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

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

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

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

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

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

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

3. Tiempo de trabajo del estudiante / Student workload

Presencial:

Clases teóricas en aula / aula virtual 35 horas

No Presencial:





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

Estudio autónomo individual o en grupo..... 50 horas
Elaboración de una memoria con ejercicios planteados en clase..... 40 horas
TOTAL (5 ECTS * 25 horas/ECTS)..... 125 horas

Contact hours:

Theoretical lessons in classroom / virtual classroom 35 hours

Independent study hours:

self-study or group study 50 hours
Elaboration of a memory based on the exercises proposed in class.... 40 hours

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

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

Convocatoria ordinaria

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

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

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

Convocatoria extraordinaria

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

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

Ordinary assessment

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



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

training and learning. The final student mark will be based on exercises that must be done during the course. There will also be an exam at the end. The next criteria will be followed for the assessment of the final mark:

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

Extraordinary assessment

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

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

5. Cronograma* / Course calendar

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

*Este cronograma tiene carácter orientativo

*This course calendar is orientative



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

ASIGNATURA / COURSE TITLE

Estados Excitados / [Excited states](#)

1.1. Código / Course number

31246 / 303149 (USAL)

1.2. Materia / Content area

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

1.3. Tipo / Course type

Optativa / [Elective subject](#)

1.4. Nivel / Course level

Master / [Master](#)

1.5. Curso / Year

1º / [1st](#)

1.6. Semestre / Semester

Anual / [Anual](#)

1.7. Número de créditos / Credit allotment

5 créditos ECTS / [5 ECTS credits](#)

1.8. Requisitos previos / Prerequisites

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

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

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



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

1.10. Datos del equipo docente / Faculty data

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

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Ines Corral Perez
Departamento de Química / **Department of Chemistry**
Facultad de Ciencias UAM / **Faculty of Sciences UAM**
Despacho - Módulo / **Office - Module**: 13 -307A
Teléfono / **Phone**: 91 497 8471
Correo electrónico/**Email**: ines.corral@uam.es
Página web/**Website**:
<http://web.uam.es/departamentos/ciencias/quimica/estruct/ines/index.html>
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: contact by email

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Jesús González Vázquez
Departamento de Química / **Department of Chemistry**
Facultad de Ciencias UAM / **Faculty of Sciences UAM**
Despacho - Módulo / **Office - Module**: 13 -308
Teléfono / **Phone**: 91 497 3008
Correo electrónico/**Email**: jesus.gonzalezv@uam.es
Página web/**Website**: http://campusys.qui.uam.es/?page_id=379
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: contact by email

1.11. Objetivos del curso / Course objectives

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

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

1.12. Contenidos del programa / Course contents

1. Funciones de energía potencial nuclear



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

- Aproximación de Born-Oppenheimer
 - Curvas de energía potencial de moléculas diatómicas
 - Superficies de energía potencial de moléculas poliatómicas
2. Interacción de la radiación y la materia
 - Modelo clásico de la radiación electromagnética
 - Probabilidad de transición inducida por la radiación
 3. Espectros rovibracionales:
 - Moléculas diatómicas: niveles de energía y reglas de selección
 - Espectros rotacionales puros y rovibracionales en diatómicas.
 - Moléculas poliatómicas: vibraciones clásicas y vibraciones cuánticas.
 - Espectros rovibracionales en poliatómicas.
 - Relajación vibracional en líquidos: métodos experimentales y tratamientos teóricos
 4. Conceptos básicos en Fotoquímica Molecular
 - Absorción de luz: (Radiación electromagnética, la ley de Lambert-Beer, Espectros de absorción, principio de Franck-Condon, Momento dipolar de transición, Oscilador armónico clásico y su versión mecánico cuántica, Reglas de Selección, Transiciones electrónicas)
 - Desactivación de los estados excitados: (Transferencia de energía y electrónica, Diagramas de Jablonski, Relajación vibracional, Transiciones radiativas y no radiativas, principio Franck-Condon para transiciones no radiativas, Ley de la diferencia de energía, Escalas de tiempo y rendimientos cuánticos, Ley de oro de Fermi)
 - Superficies de energía potencial excitadas: (cruces entre superficies, caminos de reacción fotoquímicos, ejemplos).
 5. Cálculos químico cuánticos de estados excitados: Métodos multiconfiguracionales.
 - Correlación electrónica en moléculas.
 - Métodos de estructura electrónica para el cálculo de estados excitados. Métodos monoconfiguracionales vs multiconfiguracionales. Métodos CASSCF y RASSCF. Selección del espacio activo. Cálculos *single state* vs. *state-average*. Consideraciones a la hora de elegir un conjunto de funciones de base.
 - Introducción de correlación dinámica: el método CASPT2.
 - Método CASPT2 problemas y soluciones: estados intrusos, cruces evitados y mezcla Rydberg-valencia. El método *Level shift* y MS-CASPT2
 - Ejemplos.
 6. Cálculos químico cuánticos de estados excitados: Métodos TD-DFT.
 - DFT, teoremas de Runge-Gross, TDDFT en el régimen de respuesta lineal, propagación de la densidad electrónica.
 - Cálculo de espectros, aproximación de los funcionales xc.



- Ejemplos.
7. Simulaciones dinámicas: Propagación de paquetes de onda.
 - Operador de evolución temporal, Propagación, Método de relajación, Método de filtrado. Interacción con un campo eléctrico. Funciones de correlación. Espectros y autofunciones. Espectroscopía bombeo-sonda y control.
 8. Dinámicas ultrarrápidas con TD-DFT.
 - Dinámica molecular ab initio: Dinámicas Born-Oppenheimer y Ehrenfest. Dinámicas no adiabáticas, *Tully's surface hopping*. Ejemplos de dinámicas moleculares ab initio no adiabáticas. Incorporación de efectos del entorno: campos electromagnéticos y disolvente.
1. Potential energy surfaces
 - Born-Oppenheimer approximation
 - Potential energy curves for diatomic molecules
 - Potential energy surfaces for polyatomic molecules.
 2. Interaction radiation-matter
 - Classical model for electromagnetic radiation
 - Transition probabilities induced by radiation
 3. Rovibrational spectra.
 - Diatomic molecules: energy levels, selection rules.
 - Pure rotational spectra and rovibrational spectra in diatomic molecules
 - Polyatomic molecules: classical vibrations and quantum vibrations.
 - Rovibrational spectra in polyatomic molecules
 - Vibrational relaxation in liquids: experimental methods and theoretical treatments.
 4. Basic Concepts in Modern Molecular Photochemistry
 - Light absorption: (Electromagnetic radiation, the Lambert-Beer law, Absorption spectra, Franck-Condon principle, Transition dipole moment, Classical and quantum mechanical harmonic oscillator, Selection rules, Electronic transitions)
 - Deactivation of excited states: (Energy and electron transfer, Jablonski diagrams, Vibrational relaxation, Radiative and non radiative transitions, Franck-Condon principle for radiationless transitions, the Energy gap law, Time scales and quantum yields, Fermi's golden rule)
 - Excited potential energy surfaces: (surface crossings, photochemical reaction paths, Examples).
 5. Quantum Chemical Calculations of Excited States: Multiconfigurational Methods.
 - Electron correlation in molecules.



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

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

1.13. Referencias de consulta / Course bibliography

- A. Requena y J. Zúñiga, Espectroscopía (Pearson Education, Madrid, 2004).
- P.F. Bernath, Spectra of Atoms and Molecules (Oxford University Press, Nueva York, 1995).
- J. L. McHale, Molecular Spectroscopy (Prentice Hall, New Jersey, 1999).
- J. I. Steinfeld, Molecules and Radiation (The MIT Press, Cambridge, 1989).
- W. S. Struve, Fundamentals of Molecular Spectroscopy (Wiley, Nueva York, 1989).
- S. Svanberg, Atomic and Molecular Spectroscopy (Springer-Verlag, Berlín, 2001).
- J. M. Hollas, Modern Spectroscopy (Wiley, Chichester, 1996).
- I. N. Levine, Molecular Spectroscopy (Wiley, 1980)



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

- C.A. Ullrich, Time-Dependent Density-Functional Theory: Concepts and Applications (Oxford University Press, USA, 2012).
- D. Marx and J. Hutter, Ab Initio Molecular Dynamics: Basic Theory and Advanced Methods, 1st ed. (Cambridge University Press, Cambridge, 2009).
- D.J. Tannor, Introduction to Quantum Mechanics: A Time-Dependent Perspective (University Science Books, 2006).
- edited by M.A.L. Marques, C.A. Ullrich, F. Nogueira, A. Rubio, K. Burke, and E.K.U. Gross, Time-Dependent Density Functional Theory, 1st ed. (Springer, 2006).
- M.A.L. Marques and E.K.U. Gross, Annual Review of Physical Chemistry 55, 427-455 (2004).
- P.W. Brumer and M. Shapiro, Principles of the Quantum Control of Molecular Processes, illustrated ed. (Wiley-Interscience, 2003).
- L. Serrano-Andrés and M. Merchán, Spectroscopy: Applications in Encyclopedia of Computational Chemistry (John Wiley & Sons, Ltd, 2004).
- S.A. Rice and M. Zhao, Optical Control of Molecular Dynamics, 1st ed. (Wiley-Interscience, 2000).
- edited by B.O. Roos, Lecture Notes in Quantum Chemistry II: European Summer School in Quantum Chemistry, 1st ed. (Springer-Verlag, 1994).
- E.K.U. Gross, J.F. Dobson and M. Petersilka, in Density Functional Theory II, edited by R. Nalewajski (Springer Berlin / Heidelberg, 1996), pp. 81-172.
- N.J. Turro, Modern Molecular Photochemistry (University Science Books, Mill Valley, California, 1991).
- B.O. Roos, Ab initio methods in quantum chemistry II in Advances in Chemical Physics, edited by K. P. Lawley (John Wiley & Sons, Inc., 1987), pp. 399-445.
- edited by M. Olivucci, Computational Photochemistry (Elsevier, Amsterdam, 2005).

2. Métodos docentes / Teaching methodology

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

Docencia en red: Se utilizará las distintas herramientas que ofrece la plataforma moodle (<http://www.uam.es/moodle>). Publicación de contenidos de



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

la asignatura, herramientas de trabajo en grupo: foros de discusión y wiki, correo electrónico

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

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

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

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

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

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

3. Tiempo de trabajo del estudiante / Student workload

Presencial:

Clases teóricas en aula / aula virtual 35 horas

No Presencial:

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

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

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

Contact hours:

Theoretical lessons in classroom / virtual classroom 35 hours





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

Independent study hours:

self-study or group study 50 hours
Elaboration of a memory based on the exercises proposed in class..... 40 hours

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

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

Convocatoria ordinaria

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

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

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

Convocatoria extraordinaria

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

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

Ordinary assessment

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

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

- 40% activities during the lessons in classroom
- 60% from the student report about the practical work and/or exercises.





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

Extraordinary assessment

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

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

5. Cronograma* / Course calendar

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

*Este cronograma tiene carácter orientativo

*This course calendar is orientative



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

ASIGNATURA / COURSE TITLE

Láseres / [Lasers](#)

1.1. Código / Course number

32532 / 303156 (USAL)

1.2. Materia / Content area

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

1.3. Tipo / Course type

Optativa / [Elective subject](#)

1.4. Nivel / Course level

Master / [Master](#)

1.5. Curso / Year

1º / [1st](#)

1.6. Semestre / Semester

Anual / [Annual](#)

1.7. Número de créditos / Credit allotment

5 créditos ECTS / [5 ECTS credits](#)

1.8. Requisitos previos / Prerequisites

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

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

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



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

1.10. Datos del equipo docente / Faculty data

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Paula Riviere
Departamento de Química / [Department of Chemistry](#)
Facultad de Ciencias / [Faculty of Sciences](#)
Universidad Autónoma de Madrid
Despacho - Módulo / **Office - Module**: Modulo 13- 302
Teléfono / **Phone**: +34 914973461
Correo electrónico/**Email**: paula.riviere@uam.es
Página web/**Website**: http://campusys.qui.uam.es/?page_id=123
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: contact by email

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Luca Argenti
Departamento de Química / [Department of Chemistry](#)
Facultad de Ciencias / [Faculty of Sciences](#)
Universidad Autónoma de Madrid
Despacho - Módulo / **Office - Module**: Modulo 13- 308
Teléfono / **Phone**: +34 914973461
Correo electrónico/**Email**: luca.argenti@uam.es
Página web/**Website**: http://campusys.qui.uam.es/?page_id=115
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: contact by email

1.11. Objetivos del curso / Course objectives

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

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

1.12. Contenidos del programa / Course contents

- 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.



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

5. **Efectos de campo intenso.** Frecuencias de Rabi. Desplazamiento Stark. Ionización por encima del umbral (ATI). Estados vestidos. Estados de Volkov y de Floquet. Aproximación de campo intenso. Moléculas: bond softening. Ionización aumentada.
6. **Tratamiento teórico.** Bases de estados en el continuo electrónico: Bsplines. Integración directa de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo. Métodos híbridos. Teoría del funcional de la densidad dependiente del tiempo (TDDFT).
7. **Espectroscopía resuelta en el tiempo.** Esquemas de pump-probe con pulsos láser. Usos en femtoquímica y atofísica.
8. **Control coherente de reacciones químicas.** Control del ratio entre ionización y disociación. Control óptimo.

1. **Introduction.** What is a laser? What are lasers used for? Characteristics of laser light.

2. **Laser properties.** Energy levels. Formation of spectral lines: Einstein's coefficients. Spontaneous and stimulated emission. Population inversion and saturation. Widening of spectral lines. Practical examples of lasers.

3. **Continuous wave lasers (cw) and pulsed lasers.** Generation of cw lasers. Bandwidth reduction. Formation of laser pulses by Q-switching and modelocking. Second harmonics. Attosecond lasers pulses and pulse trains.

4. **Laser-matter interaction.** Classical and quantum description. Multiphoton processes and tunneling. Three-step model. High-order Harmonic Generation (HOHG). Double ionization. Molecules: Born- Oppenheimer approximation. Coulomb explosion.

5. **Strong field effects.** Rabi frequencies. Stark shifts. Above-threshold ionization (ATI). Dressed states. Floquet and Volkov states. Strong-field approximation. Molecules: bond softening. Enhanced ionization.

6. **Theoretical approaches.** Basis of states in the electronic continuum: B-splines. Direct integration of the time-dependent Schrödinger equation. Hybrid methods. Time-dependent density functional theory (TDDFT).

7. **Time-resolved spectroscopy.** Pump-probe schemes with laser pulses. Uses in femtochemistry and attophysics.

8. **Coherent control of chemical reactions.** Control of branching ratios between ionization and dissociation. Optimal control.

1.13. Referencias de consulta / Course bibliography

1. Introduction to Laser Technology. B. Hitz, J. J. Swing and J. Hecht. IEEE Press, New York, 2001.
2. Introduction to Quantum Optics. G. Grynberg, A. Aspect and C. Fabre. Cambridge University Press. Cambridge, 2010.
3. Principles of Lasers. O. Svelto. Plenum Press, New York. 1998.
4. Laser Fundamentals. W. T. Silfvast. Cambridge University Press, Cambridge, 2004.
5. Quantum Optics. M. O. Scully. Cambridge University Press. Cambridge, 1997.



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

- Lasers. A. E. Siegman. University Science Books. 1986.
- Bachau H, Cormier E, Decleva P, Hansen J E and Martín F 2001 *Rep. Prog. Phys.* **64** 1815.
- Martín F 1999 *J. Phys. B (Topical Review)* **32** R197

2. Métodos docentes / Teaching methodology

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

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

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

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

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

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

3. Tiempo de trabajo del estudiante / Student workload

Presencial:

Clases teóricas en aula / aula virtual	34 horas
Seminarios.....	10 horas
Tutorías.....	6 horas

No Presencial:

Estudio autónomo individual o en grupo.....	35 horas
---	----------





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

Preparación de seminarios..... 20 horas
Elaboración de una memoria con ejercicios planteados en clase..... 20 horas
TOTAL (5 ECTS * 25 horas/ECTS)..... 125 horas

Contact hours:

Theoretical lessons in classroom / virtual classroom 34 hours
Seminars..... 10 hours
Tutoring..... 6 hours

Independent study hours:

self-study or group study 35 hours
Preparation of seminars, assigned tasks and study..... 20 hours
Elaboration of a memory based on the exercises proposed in class..... 20 hours
TOTAL (5 ECTS * 25 hours/ECTS)..... 125 horas

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

Convocatoria ordinaria

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

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

- 70 % Examen al final del curso
- 30 % Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura.

Convocatoria extraordinaria

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

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



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

Ordinary assessment

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

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

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

Extraordinary assessment

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

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

5. Cronograma* / Course calendar

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

*Este cronograma tiene carácter orientativo

*This course calendar is orientative



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

ASIGNATURA / COURSE TITLE

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

Código / Course number

32530 / 303154 (USAL)

Materia / Content area

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

Tipo / Course type

Optativa / [Elective subject](#)

Nivel / Course level

Master / [Master](#)

Curso / Year

1º / [1st](#)

Semestre / Semester

Anual / [Anual](#)

Número de créditos / Credit allotment

5 créditos ECTS / [5 ECTS credits](#)

Requisitos previos / Prerequisites

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

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

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



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

Datos del equipo docente / Faculty data

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Susana Gómez Carrasco (USAL)
Departamento de Química/ **Department of Physical Chemistry**
Facultad de Ciencias / **Faculty of Chemical Sciences**
Universidad de Salamanca
Despacho - Módulo / **Office - Module**: C3505
Teléfono / **Phone**: +39 923 294 485
Correo electrónico/**Email**: susana.gomez@usal.es
Página web/**Website**:
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: concertar cita por correo electrónico

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Pablo Sanz Mercado
Departamento de Química / **Department of Chemistry**
Facultad de Ciencias / **Faculty of Sciences**
Despacho - Módulo / **Office - Module**: C-08-105
Teléfono / **Phone**: +34 91 497 4167
Correo electrónico/**Email**: pablo.sanz@uam.es
Página web/**Website**:
<http://www.uam.es/departamentos/ciencias/quimica/estruct/psm/>
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: 9:00-13:00

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

Objetivos del curso / Course objectives

El objetivo es conseguir un conocimiento no solo a nivel de usuario sino a nivel de administrador de sistema de sistemas complejos de cálculo basados en UNIX/Linux. Esto incluye las operaciones cotidianas, seguridad, y también programación de Shell scripts para automatizar tareas con el objetivo de mantener un sistema de cálculo de complejidad media operativo con alta disponibilidad.

The aim is to get a knowledge not only at user level but also at system management level of complex servers based in different flavours of Unix/Linux operating systems . This includes the daily operations, security



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

hints, and scheduling shell scripts to automate tasks in order to maintain a computational cluster in high availability.

Contenidos del programa / Course contents

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

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

Referencias de consulta / Course bibliography

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

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

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

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

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

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

2. Métodos docentes / Teaching methodology



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

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

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

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

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

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

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

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

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

3. Tiempo de trabajo del estudiante / Student workload

Presencial:

Clases teóricas en aula / aula virtual 40 horas
Tutorías..... 10 horas





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

No Presencial:

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

TOTAL (5 ECTS * 25 horas/ECTS)..... 110 horas

Contact hours:

Theoretical lessons in classroom / virtual classroom 40 hours
Tutoring..... 10 hours

Independent study hours:

self-study or group study 40 hours
Elaboration of a memory based on the exercises proposed in class.... 20 hours

TOTAL (5 ECTS * 25 hours/ECTS)..... 110 hours

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

Convocatoria ordinaria

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

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

- 100 % Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura,

Convocatoria extraordinaria

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

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



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

Ordinary assessment

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

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

- 100% from the student report,

Extraordinary assessment

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

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

5. Cronograma* / Course calendar

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

*Este cronograma tiene carácter orientativo

*This course calendar is orientative



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

ASIGNATURA / COURSE TITLE

Fundamentos Matemáticos de la Mecánica Cuántica / [Mathematical Foundations of Quantum Mechanics](#)

1.1. Código / Course number

32523 / 303141 (USAL)

1.2. Materia / Content area

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

1.3. Tipo / Course type

Obligatoria / [Compulsory subject](#)

1.4. Nivel / Course level

Master / [Master](#)

1.5. Curso / Year

1º / 1st

1.6. Semestre / Semester

2º / 2nd

1.7. Número de créditos / Credit allotment

5 créditos ECTS / [5 ECTS credits](#)

1.8. Requisitos previos / Prerequisites

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



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

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

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

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

Docente(s) / [Lecturer\(s\)](#): Manuel Alcamí Pertejo
Departamento de Química/ [Department of Chemistry](#)
Facultad de Ciencias / [Faculty of Sciences](#)
Despacho - Módulo / [Office - Module](#): Módulo 13-604
Teléfono / [Phone](#): +34 91 497 3857.
Correo electrónico/[Email](#): manuel.alcami@uam.es
Página web/[Website](#):

<https://moodle.uam.es/>

Horario de atención al alumnado/[Office hours](#):

Consulta por internet o concretar cita con el profesor por email

[Ask the teacher by email to make an appointment](#)

Docente(s) / [Lecturer\(s\)](#): Juan Carlos Paniagua Valle
Departamento de Química física/ [Department of Physical Chemistry](#)
Facultad de Química / [Faculty of Chemistry](#)
Despacho - 415 / [Office](#) - 415
Teléfono / [Phone](#): +34 93 4020474
Correo electrónico/[Email](#): jpaniagua@ub.edu
Página web/[Website](#):

<http://www.ub.edu/dept-qp/grups/juanca/juanca.html>

Horario de atención al alumnado/[Office hours](#):

Concretar cita con el profesor por email

[Ask the teacher by email to make an appointment](#)

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

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

[To understand the mathematical tools needed to develop the main methods in Quantum Mechanics and to understand the main concepts and applications.](#)



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

1.12. Contenidos del programa / Course contents

Fundamentos Matemáticos de la Mecánica Cuántica

Primera Parte

- 1- Introducción. Solución de la ecuación de Schrödinger para casos sencillos
- 2- Algebra básica
- 3- Espacios funcionales.
- 4- Métodos aproximados en Química Cuántica: Principio Variacional y Teoría de Perturbaciones independiente del tiempo
- 5- Partículas independientes e idénticas
- 6- Momento Angular, spin.
- 7- Teoremas principales de la Mecánica Cuántica
- 8- Composición de momentos angulares.

Segunda Parte

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

Mathematical Foundations of Theoretical Chemistry

Part I

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



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

Part II

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

1.13. Referencias de consulta / Course bibliography

a) Nivel básico / Very basic level

Quantum Chemistry (6th edition 2008)
Ira N Levine
Prentice Hall

Student Solutions Manual for Quantum Chemistry
Ira N Levine

Molecular Quantum Mechanics (5th Edition 2010)
Peter W. Atkins , Ronald S. Friedman
Oxford University Press

Quantum Chemistry (2nd edition 2008)
Donald A. McQuarrie
University Science Books

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

b) Nivel Recomendado / Recommended level

Quantum Mechanics, Volume 1 and 2
Claude Cohen-Tannoudji , Bernard Diu , Frank Laloe
Wiley-Interscience (2005)



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

Quantum Mechanics (2nd Edition, 2000)
B.H. Bransden, C.J. Joachain
Benjamin Cummings

Problems and Solutions in Quantum Chemistry and Physics
Charles S. Johnson Jr. , Lee G. Pedersen
Dover Publications (1987)

Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory
Attila Szabo , Neil S. Ostlund
Dover Publications (1996)

c) Nivel avanzado / **Advanced level**

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

Quantum Mechanics (2 Volumes in 1)
Albert Messiah

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

2. Métodos docentes / **Teaching methodology**

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

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

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



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

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

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

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

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

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

3. Tiempo de trabajo del estudiante / Student workload

Presencial:

Clases teóricas en aula / aula virtual 31 horas
Seminarios..... 12 horas

No Presencial:

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

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

Contact hours:

Theoretical lessons in classroom / virtual classroom 31 hours
Seminars..... 12 hours





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

Independent study hours:

self-study or group study	32 hours
Preparation of seminars, assigned tasks and study.....	20 hours
Elaboration of a memory based on the exercises proposed in class....	30 hours
TOTAL (5 ECTS * 25 hours/ECTS).....	125 hours

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

Convocatoria ordinaria

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

La nota final de la asignatura se basará en

- 60% ejercicios, trabajos y discusión de los mismos que se irá realizando durante el curso.
- 40% examen.

Convocatoria extraordinaria

Se realizará un examen final único que será de carácter teórico y que abarcará los contenidos de toda la asignatura. Además el estudiante tendrá que presentar los trabajos que no haya realizado durante el curso o que haya realizado de forma incorrecta La puntuación en la convocatoria extraordinaria se realizará en base a los siguientes porcentajes:

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

Ordinary assessment

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

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



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

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

Extraordinary assessment

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

- 60% from the student exercises presented and discussions between the student and the teachers.
- 40% from an exam

5. Cronograma* / Course calendar

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

*Este cronograma tiene carácter orientativo

*This course calendar is orientative



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

ASIGNATURA / **COURSE TITLE**

Sólidos / [Solids](#)

1.1. Código / **Course number**

31248 / **303153 (USAL)**

1.2. Materia / **Content area**

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

1.3. Tipo / **Course type**

Optativa / [Elective subject](#)

1.4. Nivel / **Course level**

Master / [Master](#)

1.5. Curso / **Year**

1º / **1st**

1.6. Semestre / **Semester**

Anual / [Anual](#)

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

5 créditos ECTS / [5 ECTS credits](#)

1.8. Requisitos previos / **Prerequisites**

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

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

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



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

1.10. Datos del equipo docente / Faculty data

Docente(s) / **Lecturer(s)**: José Manuel Recio Muñiz
Departamento de Química Física y Analítica/ [Department of Analytical and Physical Chemistry](#)
Universidad de Oviedo / [University of Oviedo](#)
Despacho - Módulo / **Office - Module**: 170
Teléfono / **Phone**: 985 103036
Correo electrónico/**Email**: jmrecio@uniovi.es
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: Contact by email

Docente(s) / **Lecturer(s)**: David Abbasi Pérez
Departamento de Química Física y Analítica/ [Department of Analytical and Physical Chemistry](#)
Universidad de Oviedo / [University of Oviedo](#)
Correo electrónico/**Email**: david@fluor.quimica.uniovi.es
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: Contact by email

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Miriam Marqués Arias
Departamento de Química Física y Analítica/ [Department of Analytical and Physical Chemistry](#)
Universidad de Oviedo / [University of Oviedo](#)
Despacho - Módulo / **Office - Module**: 116
Teléfono / **Phone**: 985 102991
Correo electrónico/**Email**: mmarques@staffmail.ed.ac.uk
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: Contact by email

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

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

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Antonio M. Marquez Cruz
Departamento de Química Física Aplicada/ [Department of Applied Physical Chemistry](#)
Universidad de Sevilla / [University of Sevilla](#)
Correo electrónico/**Email**: marquez@us.es
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: Contact by email



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

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Francesc Illas Riera
Departament de Química Física & Institut de Química Teòrica i Computacional (IQTCUB) / **Department of Physical Chemistry & Institute of Computational and Theoretical Chemistry**
Universitat de Barcelona / **University of Barcelona**
Correo electrónico/**Email**: francesc.illas@ub.edu
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: Contact by email

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

Proporcionar al alumno la metodología básica para el tratamiento en sistemas condensados periódicos puros y con defectos de los siguientes aspectos: Cristalografía; Estructura electrónica; Termodinámica; Transiciones de fase; Superficies; Catálisis heterogénea; Propiedades estructurales, ópticas y magnéticas de impurezas; Magnetismo. En el curso regular M1 y en el curso satélite ZCAM asociado los estudiantes recibirán una introducción intensiva a la modelización y tratamiento de estos problemas en el estado sólido.

To provide to the students the basic methodology to treat pure and defective periodic systems of condensed matter dealing with the following topics: Crystallography; Electronic structure; Thermodynamics; Phase transitions; Surfaces; Heterogeneous catalysis; Structural, optical and magnetical properties of defects; Magnetism. In the regular M1 course and the associated ZCAM satellite the students will receive an intensive introduction to the modelization and treatment of all these issues in solids.

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

1. CRISTALOGRAFÍA

- 1.1 Simetría en cristales.
- 1.2 Cálculos cristalográficos

2. ESTRUCTURA ELECTRÓNICA

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

3. TERMODINÁMICA

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

4. ENLACE QUÍMICO

- 4.1 Topologías inducidas por campos escalares en cristales
- 4.2 Descomposición microscópica de propiedades observables

5. CÁLCULOS AB INITIO DE ESTRUCTURA ELECTRÓNICA EN SÓLIDOS

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



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

6. PROPIEDADES TERMODINÁMICAS DE SÓLIDOS CRISTALINOS

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

7. SIMULACIÓN AB INITIO DE PROPIEDADES ÓPTICAS Y MAGNÉTICAS E INESTABILIDADES EN SÓLIDOS

- 7.1 Impurezas en sólidos cristalinos
- 7.2 Inestabilidad

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

- 8.1 Modelos de cluster y modelos periódicos
- 8.2 Adsorción y reactividad en superficies

9. DINÁMICA MOLECULAR AB INITIO

- 9.1 Mecánica estadística
- 9.2 Dinámica molecular ab initio: formulación Carr-Parrinello

10. ELEMENTOS DE MAGNETISMO MOLECULAR Y CRISTALINO

- 10.1 Hamiltonianos modelo y efectivos
- 10.2 Aplicaciones

1. CRYSTALLOGRAPHY

- 1.1 Symmetry in crystals
- 1.2 Crystallography computing

2. ELECTRONIC STRUCTURE

- 2.1 Cluster and periodic models
- 2.2 Computational methodologies

3. THERMODYNAMICS

- 3.1 Static approximation and thermal models
- 3.2 Phase transitions

4. CHEMICAL BONDING

- 4.1 Scalar field induced topologies in crystals
- 4.2 Microscopic decomposition of observable properties

5. AB INITIO ELECTRONIC STRUCTURE CALCULATIONS IN SOLIDS

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

6. THERMODYNAMIC PROPERTIES OF CRYSTALLINE SOLIDS

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

7. AB INITIO SIMULATIONS OF OPTICAL AND MAGNETIC PROPERTIES AND INESTABILITIES IN SOLIDS

- 7.1 Impurities in crystalline solids
- 7.2 Inestability



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

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

8.1 Cluster and periodic models

8.2 Adsorption and reactivity in surfaces

9. AB INITIO MOLECULAR DYNAMICS

9.1 Statistical mechanics

9.2 Ab initio molecular dynamics: Carr-Parrinello formulation

10. ELEMENTS OF MOLECULAR AND CRYSTALLINE MAGNETISM

10.1 Model and effective hamiltonians

10.2 Applications

1.13. Referencias de consulta / Course bibliography

- [01] L. Kantorovich, "Quantum Theory of the Solid State" (Kluwer, Dordrecht, The Netherlands, 2004).
- [02] R. M. Martin, "Electronic Structure: Basic theory and practical methods" (Cambridge UP, Cambridge, UK, 2004).
- [03] E. Kaxiras, "Atomic and Electronic Structure of Solids" (Cambridge UP, Cambridge, UK, 2003).
- [04] O. Anderson, "Equations of State for Solids in Geophysics and Ceramic Science" (Oxford UP, Oxford, UK, 1995).
- [05] A. Otero-de-la-Roza and V. Luaña, "Equations of state and thermodynamics of solids using empirical corrections in the quasiharmonic approximation", Phys. Rev. B 84 (2011) 024109.
- [06] A. R. Oganov, Ed, "Modern methods of crystal structure prediction" (Wiley-VCH, 2011).
- [07] J. P. Poirier, "Introduction to the Physics of the Earth's Interior" (Cambridge UP, Cambridge, UK, 2000).
- [08] B. Bersuker, "The Jahn-Teller effect" (Cambridge UP, Cambridge, UK, 2006).
- [09] A. Otero-de-la-Roza, E. R. Johnson and V. Luaña, "Critic2: a program for real-space analysis of quantum chemical interactions in solids", Comput. Phys. Commun. (submitted)
- [10] M. Moreno, M. T. Barriuso, J. A. Aramburu, P. García-Fernández and J. M. García-Lastra, "Microscopic insight into properties and electronic instabilities of impurities in cubic and lower symmetry insulators: the influence of pressure ", J. Phys.: Condens. Matter 18 (2006) R315.
- [11] P. García-Fernández, A. Trueba, J. M. García Lastra, M. T. Barriuso, M. Moreno, and J. A. Aramburu, "Instabilities in doped materials driven by pseudo Jahn-Teller mechanisms", in "The Jahn-Teller effect", Ed. by H. Koeppe, D. R. Yarkony, and H. Barentzen (Springer Series of Chemical Physics, Springer, Heidelberg, 2009) p. 415--450.
- [12] J.L. Whitten and H. Yang, "Theory of Chemisorption and reactions on metal surfaces" Surf. Sci. rep. 24, 59 (1996)
- [13] A. R. Leach, "Molecular modeling" (Prentice Hall, 2001).
- [14] T. Schlick, "Molecular modeling and simulation" (Springer, 2002).



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

- [15] D. Marx and J. Hutter, "Ab initio molecular dynamics: Theory and implementation", in "Modern methods and algorithms on quantum chemistry" by J. Grotendorst (Ed.), (John von Neumann Institute, NIC series vol. 1 \& 3, 2000).
- [16] E. Runge and E. K. U. Gross, "Density-Functional Theory for Time-Dependent Systems", Phys. Rev. Lett. 52 (1984) 997.
- [17] C. Fiolhais, F. Nogueira and M. A. L. Marques, Eds. "A Primer in Density Functional Theory", (Springer, Heidelberg, 2003).
- [18] R. Dronskowski "Computational Chemistry of Solid State Materials" (Wiley-VCH, 2005).
- [19] P. Huang, and E. A. Carter, "Advances in Correlated Electronic Structure Methods for Solids, Surfaces and Nanostructures", Ann. Rev. Phys. Chem. 59 (2008) 261.
- [20] G. Pacchioni, A. M. Ferrari, A. M. Márquez, and F. Illas, "Importance of Madelung Potential in Quantum Chemical Modeling of Ionic Surfaces", J. Comput. Chem. 18 (1997) 617.
- [21] J. N. Norskov, F. Abild-Pedersen, F. Studt, and T. Bligaard "Density functional theory in surface chemistry and catalysis" PNAS 108 (2011) 937-943.
- [22] F. Yang, J. Graciani, J. Evans, P. Liu, J. Hrbek, J. Fernández. Sanz, and J. A. Rodríguez, "CO oxidation on inverse CeOx/Cu(111) Catalysts: High catalytic activity and ceria-promoted dissociation of O₂", J. Am. Chem. Soc. 133 (2011) 3444.
- [23] R. Valero, F. Illas and D. G. Truhlar, "Magnetic Coupling in Transition Metal Binuclear Complexes by Spin-Flip Time-Dependent Density Functional Theory". J. Chem. Theory and Comput., 7 (2011) 3523-3531.

2. Métodos docentes / Teaching methodology

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

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

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

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



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

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

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

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

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

3. Tiempo de trabajo del estudiante / Student workload

Presencial:

Clases teóricas en aula / aula virtual 50 horas

No Presencial:

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

Elaboración de una memoria con ejercicios planteados en clase..... 30 horas

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

Contact hours:

Theoretical lessons in classroom / virtual classroom 50 hours

Independent study hours:

self-study or group study 45 hours

Elaboration of a memory based on the exercises proposed in class..... 30 hours

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



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

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

Convocatoria ordinaria

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

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

- 60 % Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura,
- 40 % la discusión que sobre la misma se realice con el profesor en tutorías y seminarios.

Convocatoria extraordinaria

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

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

Ordinary assessment

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

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

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

Extraordinary assessment

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

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



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

5. Cronograma* / **Course calendar**

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

*Este cronograma tiene carácter orientativo

[*This course calendar is orientative](#)



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

ASIGNATURA / **COURSE TITLE**

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

1.1. Código / **Course number**

32524 / 303142 (USAL)

1.2. Materia / **Content area**

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

1.3. Tipo / **Course type**

Obligatoria / [Compulsory subject](#)

1.4. Nivel / **Course level**

Master / [Master](#)

1.5. Curso / **Year**

1º / 1st

1.6. Semestre / **Semester**

Anual / [Anual](#)

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

5 créditos ECTS / [5 ECTS credits](#)

1.8. Requisitos previos / **Prerequisites**

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



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

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

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

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

Docente(s) / [Lecturer\(s\)](#): Aguilar Espinosa, Manuel Ángel
Departamento de Ingeniería Química y Química Física / [Department of Chemical engineering and Physical Chemistry](#)
Universidad de Extremadura / [Extremadura University](#)
Teléfono / [Phone](#): . +34-924289300 Ext:86126
Correo electrónico/[Email](#): maguilar@unex.es
Página web/[Website](#):
Horario de atención al alumnado/[Office hours](#): 10:00-14:00

Docente(s) / [Lecturer\(s\)](#): Vázquez, Saulo
Departamento de Química Física / [Department of Physical Chemistry](#)
Universidad de Santiago de Compostela / [Santiago of Compostela University](#)
Teléfono / [Phone](#): . +34 8818 15709
Correo electrónico/[Email](#): saulo.vazquez@usc.es
Página web/[Website](#):<http://www.usc.es/ciqus/en/groups/chemical-dynamics-simulations>
Horario de atención al alumnado/[Office hours](#): contact by email

Docente(s) / [Lecturer\(s\)](#): Aguirre, Néstor
Departamento de Química / [Department of Chemistry](#)
Facultad de Ciencias / [Faculty of Sciences](#)
Universidad Autónoma de Madrid / [Autonoma of Madrid University](#)
Teléfono / [Phone](#): . +34 914972573
Correo electrónico/[Email](#): nestor.aguirre@uam.es
Página web/[Website](#): http://campusys.qui.uam.es/?page_id=403
Horario de atención al alumnado/[Office hours](#): contact by email

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

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



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

En la parte correspondiente a la Mecánica Estadística se busca que los alumnos comprendan la base de la Mecánica Estadística formulada a partir de las colectividades. El alumno debe entender las características de los colectivos más importantes (microcanónico, canónico y gran canónico), y saber elegir el más conveniente según sea el sistema químico que se desee estudiar. También debe entender las diferencias entre las estadísticas cuánticas de Fermi-Dirac y de Bose-Einstein, así como las situaciones en las que estas conducen al límite clásico. El alumno debe saber calcular funciones de partición y aplicar las estadísticas cuánticas y la clásica a los sistemas ideales de interés en Química.

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

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

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

As practical application, the students will calculate enthalpic and entropic corrections to free energy differences of systems of chemical interest using information obtained from Quantum Mechanics calculations. Furthermore, they will analyze the structure and properties of liquids using simulation techniques.

1.12. Contenidos del programa / Course contents

1- Mecánica Estadística

- Colectivos y postulados de la mecánica estadística.



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

- Colectivos microcanónico, canónico y grancanónico.
- Estadísticas de Fermi-Dirac, Bose-Einstein y Boltzmann.
- Mecánica estadística clásica.
- Aplicaciones a sistemas ideales: gases ideales, gas ideal de fotones, fonones, electrones en metales.
- Sistemas de partículas que interactúan: gases reales diluidos, segundo coeficiente del virial, ecuación de van der Waals.

2- Aplicaciones

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

1- Statistical Mechanics

- Ensembles and postulates of statistical mechanics.
- Microcanonical, canonical and grand canonical ensembles.
- Fermi-Dirac, Bose-Einstein and Boltzmann statistics.
- Classical statistical mechanics. Applications to ideal systems: ideal gases, ideal gas of photons, phonons, electrons in metals.
- Systems of interacting particles: dilute real gases, second virial coefficient, van der Waals equation.

2- Applications

- Monte Carlo Method
- Calculation of thermodynamic and structural properties
- Practical aspects of computer simulation

1.13. Referencias de consulta / Course bibliography

Theoretical and Computational Chemistry: Foundations, Methods and Techniques. J. Andrés y J. Bertrán. Eds. Publ. Univ. Jaime I (Castellón) 2007

Chandler, D., "Introduction to Modern Statistical Mechanics", (Oxford University Press, London, 1986)

Hill, T. L., "An Introduction to Statistical Thermodynamics" (Dover, New York) 1986

McQuarrie, D. A., "Statistical Mechanics", (Harper and Row, New York) 1976

Toda, M., Kubo, R., Saito, N., "Statistical Physics I, (Springer-Verlag, Heidelberg) 1992

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



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

2. Métodos docentes / Teaching methodology

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

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

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

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

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

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

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

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



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

3. Tiempo de trabajo del estudiante / Student workload

Presencial:

Clases teóricas en aula / aula virtual 25 horas
Seminarios..... 10 horas

No Presencial:

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

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

Contact hours:

Theoretical lessons in classroom / virtual classroom 25 hours
Seminar..... 10 hours

Independent study hours:

self-study or group study 40 hours
Preparation of seminars, assigned tasks and study..... 20 hours
Elaboration of a memory based on the exercises proposed in class.... 30 hours

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

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

Convocatoria ordinaria

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

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

- 60 % Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura,



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

- 40 % la discusión que sobre la misma se realice con el profesor en tutorías y seminarios.

Convocatoria extraordinaria

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

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

Ordinary assessment

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

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

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

Extraordinary assessment

The student will have to face a final exam, including both theory and practical exercises. The latter consists in an individual work that the student will have to do with the programs used during the course. The student mark will be obtained from:

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

5. Cronograma* / Course calendar

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

*Este cronograma tiene carácter orientativo

*This course calendar is orientative



Asignatura: Simetría en átomos, moléculas y sólidos y Mecánica Cuántica
Código: 32525
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Master en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Master
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

ASIGNATURA / COURSE TITLE

Simetría en átomos, moléculas y sólidos / [Symmetry in atoms, molecules and solids](#)

1.1. Código / [Course number](#)

32525 / 303143 (USAL)

1.2. Materia / [Content area](#)

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

1.3. Tipo / [Course type](#)

Obligatoria / [Compulsory subject](#)

1.4. Nivel / [Course level](#)

Master / [Master](#)

1.5. Curso / [Year](#)

1º / 1st

1.6. Semestre / [Semester](#)

2º / 2nd

1.7. Número de créditos / [Credit allotment](#)

5 créditos ECTS / [5 ECTS credits](#)

1.8. Requisitos previos / [Prerequisites](#)

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

1.9. Requisitos mínimos de asistencia a las sesiones presenciales / [Minimum attendance requirement](#)

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



Asignatura: Simetría en átomos, moléculas y sólidos y Mecánica Cuántica
Código: 32525
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Master en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Master
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

1.10. Datos del equipo docente / Faculty data

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Pablo Garcia Fernandez
Departamento de Ciencias de la Tierra y física de la materia condensada/
[Department of Earth Sciences and Solid State Physics](#)
Universidad de Cantabria / [University of Cantabria](#)
Teléfono / **Phone**: 942202069
Correo electrónico/**Email**: garciapa@unican.es
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: Contact by email

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

1.11. Objetivos del curso / Course objectives

Dotar al alumno de la base matemática necesaria para el correcto tratamiento de la simetría en átomos, moléculas y sólidos, con énfasis en las posibles aplicaciones.

[To provide the students with the mathematical background necessary to adequately treat the symmetry in atoms, molecules and solids with special emphasis in posible applications.](#)

1.12. Contenidos del programa / Course contents

1. Teoría de Grupos y simetría
 - Simetría en la ciencia
 - Isometrías del espacio euclídeo
 - Introducción a la teoría de grupos abstractos
 - Introducción a la teoría de representaciones
 - Representaciones matriciales de grupos de simetría
 - Representaciones irreducibles

2. Simetría en moléculas
 - Grupos y representaciones en mecánica cuántica
 - Aplicaciones de la teoría de grupos en química cuántica

3. Simetría en Sólidos
 - Simetrías espaciales
 - Estructuras isótropas y anisótropas
 - Red recíproca de una red de Bravais.
 - Aplicación a funciones de onda electrónicas



Asignatura: Simetría en átomos, moléculas y sólidos y Mecánica Cuántica
Código: 32525
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Master en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Master
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

1. Group theory and symmetry
 - Symmetry in science
 - Isometries of the euclidean space
 - Introduction to abstract group theory
 - Introduction to representation theory
 - Matrix representations of symmetry groups
 - Irreducible representations
2. Symmetry in molecules
 - Groups and representations in quantum mechanics
 - Application of group theory in quantum chemistry
3. Symmetry in solids
 - Spatial symmetries
 - Isotropic and anisotropic structures
 - Reciprocal lattice of a Bravais lattice
 - Application to electronic wavefunctions

1.13. Referencias de consulta / [Course bibliography](#)

- Charles C. Pinter *A Book of Abstract Algebra*, Dover, (New York) 2010
- Roy Mc Weeny *Symmetry. An Introduction to Group Theory and its Applications*, Dover (New York) 2002
- D.M. Bishop, *Group Theory and Chemistry*. Clarendon Press (New York) 1973
- M. Tinkham. *Group Theory and Quantum Mechanics*. MacGraw Hill (New York) 1974
- Dove, *Structure and Dynamics*. Oxford University Press (Oxford) 2003
- C. Hammond. *The Basics of Crystallography and Diffraction*. Oxford University Press (Oxford) 2001
- C. Kittel. *Introduction to Solid State Physics*. Wiley (New York) 2004
- N.W. Ashcroft y N.D. Mermin. *Solid State Physics*. Saunders College () 1976
- M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus y A. Jorio, *Group Theory: Applications to the Physics of Condensed Matter*, Springer (2008)

2. Métodos docentes / [Teaching methodology](#)





Asignatura: Simetría en átomos, moléculas y sólidos y Mecánica Cuántica
Código: 32525
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Master en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Master
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

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

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

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

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

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

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

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

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

3. Tiempo de trabajo del estudiante / Student workload

Presencial:

Clases teóricas en aula / aula virtual 20 horas
Seminarios..... 20 horas





Asignatura: Simetría en átomos, moléculas y sólidos y Mecánica Cuántica
Código: 32525
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Master en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Master
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

No Presencial:

Estudio autónomo individual o en grupo.....	35 horas
Preparación de seminarios.....	20 horas
Elaboración de una memoria con ejercicios planteados en clase.....	30 horas
TOTAL (5 ECTS * 25 horas/ECTS).....	125 horas

Contact hours:

Theoretical lessons in classroom / virtual classroom	20 hours
Seminar.....	20 hours

Independent study hours:

self-study or group study	35 hours
Preparation of seminars, assigned tasks and study.....	20 hours
Elaboration of a memory based on the exercises proposed in class....	30 hours
TOTAL (5 ECTS * 25 hours/ECTS).....	125 hours

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

Convocatoria ordinaria

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

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

- 50 % Simetría en átomos y moléculas
 - 30 % Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura,
 - 20 % la discusión que sobre la misma se realice con el profesor en tutorías y seminarios
- 50 % Simetría en sólidos cristalinos



Asignatura: Simetría en átomos, moléculas y sólidos y Mecánica Cuántica
Código: 32525
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Master en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Master
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

- 15% realización de resolución de problemas estándar relacionados con la asignatura y que se entregarán antes del intensivo
- 5% test sobre la identificación de grupos espaciales a llevar a cabo durante el curso intensivo
- 10% realización de ejercicios avanzados a llevar a cabo con herramientas disponibles libre en internet (servidor de cristalografía de Bilbao)
- 20% examen a llevar a cabo al final del curso

Convocatoria extraordinaria

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

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

Ordinary assessment

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

The final student mark will be based on exercises that must be done during the course and tests carried out mid-semester and at the end of the course. The next criteria will be followed for assessment of student exercises:

- 50 % Symmetry in atoms and molecules
 - 30% from the student report,
 - 20% from discussions between the student and professor in tutoring sessions and seminars.
- 50 % Symmetry in solids
 - 15% solution of standard problems associated to the course theory to be handed before the intensive course
 - 5% test on identification of space groups carried out during the intensive course
 - 10% solution of advanced exercises with the help of tools freely available in the internet (Bilbao's crystallographic server)
 - 20% exam at the end of the course

Extraordinary assessment

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





Asignatura: Simetría en átomos, moléculas y sólidos y Mecánica Cuántica
Código: 32525
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Master en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Master
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

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

5. Cronograma* / [Course calendar](#)

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

*Este cronograma tiene carácter orientativo

[*This course calendar is orientative](#)



Asignatura: Métodos de la Química Teórica I
Código: 32527
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Master en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Master
Tipo: Formación bligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

ASIGNATURA / COURSE TITLE

Métodos de la Química Teórica I / [Theoretical Chemistry Methods I](#)

1.1. Código / Course number

32527 / 303145 (USAL)

1.2. Materia / Content area

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

1.3. Tipo / Course type

Obligatoria / [Compulsory subject](#)

1.4. Nivel / Course level

Master / [Master](#)

1.5. Curso / Year

1º / [1st](#)

1.6. Semestre / Semester

2º / [2nd](#)

1.7. Número de créditos / Credit allotment

5 créditos ECTS / [5 ECTS credits](#)

1.8. Requisitos previos / Prerequisites

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

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

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



Asignatura: Métodos de la Química Teórica I
Código: 32527
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Master en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Master
Tipo: Formación bligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

1.10. Datos del equipo docente / Faculty data

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Victor Rayón
Departamento de Química/ **Department of Chemistry**
Universidad de Valladolid / **University of Valladolid**
Teléfono / **Phone**: 983184017
Correo electrónico/**Email**: vmrr@qf.uva.es
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: 10:00-14:00

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Manuel Yáñez
Departamento de Química/ **Department of Chemistry**
Facultad de Ciencias / **Faculty of Sciences**
Despacho - Módulo / **Office - Module**: Modulo 13- 607
Teléfono / **Phone**: +34914974953
Correo electrónico/**Email**: manuel.yanez@uam.es
Páginaweb/**Website**:
<http://www.uam.es/departamentos/ciencias/quimica/estruct/manuel/>
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: contact by email

1.11. Objetivos del curso / Course objectives

Después de cursar la asignatura los alumnos deberá estar en capacidad de:

- Comprender los fundamentos teóricos y prácticos de técnicas computacionales con las que puede analizar la estructura electrónica, morfológica y estructural de un compuesto e interpretar adecuadamente los resultados.
- Entender los principios básicos de las metodologías "ab initio" y Teoría de los Funcionales de la Densidad.
- Discernir entre los diferentes métodos existentes y cómo seleccionar el más adecuado para cada problema.
- Demostrar su conocimiento y comprensión de los hechos aplicando conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química Teórica y Modelización Computacional.

As a result of participating in this course, students will be able to:

- Understand the theoretical and practical bases of computational techniques used in the electronic, structural and morphological analysis of a compound and interpret the results adequately.
- Understand the basic principles of "ab initio" methods, and Density Functional Theory.
- Shed light on what method is the most appropriate for each problem, considering the differences between them.
- Demonstrate knowledge and comprehension of the facts, applying concepts, principles and theories associated with Theoretical Chemistry and Computational Modelling.



Asignatura: Métodos de la Química Teórica I
Código: 32527
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Master en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Master
Tipo: Formación obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

1.12. Contenidos del programa / Course contents

1. Métodos Ab initio:

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

2. Teoría del Funcional de la Densidad:

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

En la parte de Métodos de la Química Cuántica se cubre los teoremas fundamentales en los que se basan los métodos y la formulación de los principales métodos "ab initio". En el apartado correspondiente a la Teoría del Funcional de la Densidad se pretende que el alumno entienda los principios básicos de la teoría. Comprenda cómo se desarrollan los principales tipos de funcionales de intercambio-correlación y sus características. El alumno debe ser capaz de discernir entre los diferentes métodos existentes cómo seleccionar el más adecuado para cada problema.

1. Ab initio Methods:

- Hartree-Fock methods: RHF y UHF
- Basis functions, pseudopotentials and effective potential.
- Wavefunction-based Electron Correlation Methods: Configuration Interaction, Coupled Cluster, Multiconfigurational methods
- Moller-Plesset Perturbation Theory

2. Density Functional Theory:

- Preliminary concepts. Hohenberg-Kohn Theorems.
- Kohn-Sham Method.
- Approximations (exchange-correlation functionals)
- Conceptual DFT

In the part of Quantum Chemical Methods we will formulate the main theorems in which the different methodologies are based and the most important "ab initio" methods will be studied. In the Functional Density Theory section the students should understand the basis ideas in which the theory is based. The student should understand how the different correlation-exchange functionals are developed and their main features. The student should know how to select the most adequate method for a fixed problem.



Asignatura: Métodos de la Química Teórica I
Código: 32527
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Master en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Master
Tipo: Formación obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

1.13. Referencias de consulta / Course bibliography

- Helgaker, T., Jørgensen, P., Olsen, J.; Molecular Electronic-Structure Theory. John Wiley & Sons Ltd, 2000.
- Szabo, A., Ostlund, N. S.; Modern Quantum Chemistry. Introduction to Advanced Electronic Structure Theory. McGraw-Hill, 1989
- Roos, B. Editor; Lecture notes in quantum chemistry: European summer school in quantum chemistry. Springer-Verlag 1994. Chapters on CC, CI, MCSCF, calibration.
- Linear-Scaling Techniques in Computational Chemistry and Physics. Zaleśny, R.; Papadopoulos, M.G.; Mezey, P.G.; Leszczynski, J. (Eds.). Springer (Berlin) 2011.

2. Métodos docentes / Teaching methodology

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

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

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

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

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

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



Asignatura: Métodos de la Química Teórica I
Código: 32527
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Master en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Master
Tipo: Formación bligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

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

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

3. Tiempo de trabajo del estudiante / Student workload

Presencial:

Clases teóricas en aula / aula virtual 20 horas
Seminarios..... 15 horas

No Presencial:

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

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

Contact hours:

Theoretical lessons in classroom / virtual classroom 20 hours
Seminar..... 15 hours

Independent study hours:

self-study or group study 40 hours
Preparation of seminars, assigned tasks and study..... 20 hours
Elaboration of a memory based on the exercises proposed in class..... 30 hours

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

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

Convocatoria ordinaria

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



Asignatura: Métodos de la Química Teórica I
Código: 32527
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Master en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Master
Tipo: Formación bligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

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

- 70 % Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura,
- 30 % la discusión que sobre la misma se realice con el profesor en tutorías y seminarios.

Convocatoria extraordinaria

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

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

Ordinary assessment

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

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

- 70% from the student report,
- 30% from discussions between the student and professor in tutoring sessions and seminars.

Extraordinary assessment

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

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

5. Cronograma* / Course calendar

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

*Este cronograma tiene carácter orientativo

*This course calendar is orientative





Asignatura: Métodos de la Química Teórica II
Código: 32528
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Master en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Master
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

ASIGNATURA / COURSE TITLE

Métodos de la Química Teórica II / [Theoretical Chemistry Methods II](#)

1.1. Código / Course number

32528 / 303146 (USAL)

1.2. Materia / Content area

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

1.3. Tipo / Course type

Obligatoria / [Compulsory subject](#)

1.4. Nivel / Course level

Master / [Master](#)

1.5. Curso / Year

1º / 1st

1.6. Semestre / Semester

2º / 2nd

1.7. Número de créditos / Credit allotment

5 créditos ECTS / [5 ECTS credits](#)

1.8. Requisitos previos / Prerequisites

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



Asignatura: Métodos de la Química Teórica II
Código: 32528
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Master en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Master
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

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

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

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

Docente(s) / [Lecturer\(s\)](#): Iñaki Tuñon
Departamento de Química Física / [Department of Physical Chemistry](#)
Universidad de Valencia / [University of Valencia](#)
Teléfono / [Phone](#): 963544332
Correo electrónico/[Email](#): ignacio.tunon@uv.es
Página web/[Website](#): <http://www.uv.es/tunon/>
Horario de atención al alumnado/[Office hours](#): Contact by email

Docente(s) / [Lecturer\(s\)](#): Vicent Moliner
Departamento de Química Física y Analítica / [Department of Physical Chemistry and Analytical Chemistry](#)
Universitat Jaume I / [Jaume I University](#)
Teléfono / [Phone](#): 964728084
Correo electrónico/[Email](#): moliner@uji.es
Página web/[Website](#): <http://www.biocomp.uji.es>
Horario de atención al alumnado/[Office hours](#): Contact by email

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

Esta es la segunda asignatura del Máster dedicada a métodos de la Química Teórica y Computacional. En este caso el acento se pone en los métodos para el estudio de sistemas moleculares de gran tamaño y con un gran número de conformaciones accesibles. Por ello la asignatura se centra en tres grandes objetivos:

- Cálculo de la energía para sistemas de gran tamaño: Campos de fuerza, métodos de continuo y métodos QM/MM
- Exploración del espacio configuracional: Métodos de dinámica molecular clásica y cuántica
- Obtención de propiedades dinámicas a través de simulaciones de de dinámica molecular

Más específicamente, se plantean una serie de objetivos particulares en forma de preguntas:

- ¿Cómo podemos describir sistemas moleculares muy grandes, tales como proteínas o ácidos nucleicos?



Asignatura: Métodos de la Química Teórica II
Código: 32528
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Master en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Master
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

- ¿Cómo describir sistemas moleculares muy grandes cuando se necesita una descripción cuántica de parte de él?
- ¿Cómo describir interacciones intermoleculares en sistemas grandes?
- ¿Cómo describir moléculas en disolución?
- ¿Cuáles son las ventajas y desventajas de los modelos de continuo?
- ¿Cómo obtener propiedades promedio y de equilibrio en sistemas con muchas configuraciones accesibles?
- ¿Cómo se pueden calcular propiedades dependientes del tiempo?

This is the second course of the Master devoted to methods of Theoretical and Computational Chemistry. In this case the focus is on methods for the study of large molecular systems with a large number of accessible conformations. Therefore, the course focuses on three main objectives:

- Calculation of the energy for large systems: force fields, and methods continually nematodes QM / MM
- Exploring the configurational space: Methods of classical and quantum molecular dynamics
- Obtaining dynamic properties through molecular dynamics simulations

More specifically, the specific objectives of the course in the form of questions are:

- How can we describe large molecular systems such as proteins or nucleic acids?
- How to describe large molecular systems when a subset of atoms has to be described by quantum mechanics?
- How to describe intermolecular interactions in large systems?
- How to describe molecules in solution?
- Which are the advantadges/disadvantadges of continuum models?
- How to get average and equilibrium properties in systems with many configurations available?
- How can we calculate time-dependent properties?

1.12. Contenidos del programa / Course contents

- Mecánica Molecular: Fuerzas intermoleculares, Campos de Fuerza: etsrategias de parametrización
- Métodos de simulación: Dinámica Molecular, Métodos MonteCarlo
- Dinámica Molecular Carr-Parrinello y Born-Oppenheimer
- QSAR: ecuaciones, validación. aplicaciones



Asignatura: Métodos de la Química Teórica II
Código: 32528
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Master en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Master
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

- Métodos de solvente: modelos discretos, continuos, mixtos. Modelos híbridos QM/MM
- Cálculos de energía libre.
- Molecular Mechanics: Intermolecular Forces. Force Fields: parametrization strategies
- Simulation Methods: Molecular Dynamics. Monte Carlo Methods
- Carr-Parrinello and Born-Oppenheimer Molecular Dynamics
- QSAR. Equations, Validation, Applications
- Solvation Models: Discrete, Continuum and Mixed Models. Hybrid QM/MM Models
- Free Energy Calculations.

1.13. Referencias de consulta / Course bibliography

- M. P. Allen, D. J. Tildesley
Computer Simulation of Liquids
Oxford University Press, New York 1989
- A. R. Leach
Molecular Modelling
Longman, London, 1996
- D. Frenkel & B. Smit
Understanding Molecular Simulation
Academic Press, San Diego, 1996
- A. Stone
The Theory of Intermolecular Forces
Oxford University Press, 2013

2. Métodos docentes / Teaching methodology

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

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



Asignatura: Métodos de la Química Teórica II
Código: 32528
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Master en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Master
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

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

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

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

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

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

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

3. Tiempo de trabajo del estudiante / Student workload

Presencial:

Clases teóricas en aula / aula virtual 20 horas
Seminarios..... 15 horas

No Presencial:

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

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



Asignatura: Métodos de la Química Teórica II
Código: 32528
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Master en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Master
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

Contact hours:

Theoretical lessons in classroom / virtual classroom 20 hours
Seminars..... 15 hours

Independent study hours:

self-study or group study 40 hours
Preparation of seminars, assigned tasks and study..... 20 hours
Elaboration of a memory based on the exercises proposed in class.... 30 hours

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

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

Convocatoria ordinaria

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

La nota final de la asignatura se basará en los ejercicios, trabajos y discusión de los mismos que se irá realizando durante el curso. Además se podrá realizar un examen cuyo peso en la nota final nunca superará el 40% del total.

Convocatoria extraordinaria

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

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

Ordinary assessment

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

The final student mark will be based on exercises that must be done during the course. In addition, an exam could be performed with a weight in the final mark never higher than 40%.

Extraordinary assessment



Asignatura: Métodos de la Química Teórica II
Código: 32528
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Master en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Master
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

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

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

5. Cronograma* / **Course calendar**

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

*Este cronograma tiene carácter orientativo

*This course calendar is orientative

CURSO DE LENGUA EUROPEA (INGLÉS)

1.- Datos de la Asignatura

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

Datos del profesorado

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

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

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

3.- Recomendaciones previas

--

--

4.- Objetivos de la asignatura

Completar o adquirir la capacidad de oral y escrita necesaria para leer textos científicos en inglés y seguir clases explicadas por no nativos.

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

5.- Contenidos

A determinar por la profesor en función del nivel del alumnado, de acuerdo con los objetivos de la asignatura.

6.- Competencias a adquirir

Específicas.

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

Básicas/Generales.

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

Transversales.

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

7.- Metodologías docentes

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

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

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

8.- Previsión de distribución de las metodologías docentes

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

9.- Recursos

Libros de consulta para el alumno

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

10.- Evaluación

Consideraciones Generales

Criterios de evaluación

Convocatoria ordinaria.

E02 10%

E03 20%

E07 60%

E11 10%

Convocatoria extraordinaria

E02 10%

E03 20%

E07 60%

E11 10%

Instrumentos de evaluación

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

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

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

Recomendaciones para la evaluación.

Recomendaciones para la recuperación.