



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE MADRID

33427 - DE LA TEORÍA A LA IMPLEMENTACIÓN: TUTORIALES EN QUÍMICA TEÓRICA

Información de la asignatura

Código - Nombre: 33427 - DE LA TEORÍA A LA IMPLEMENTACIÓN: TUTORIALES EN QUÍMICA TEÓRICA

Titulación: 748 - Máster Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelización Computacional
762 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2021)

Centro: 104 - Facultad de Ciencias

Curso Académico: 2021/22

1. Detalles de la asignatura

1.1. Materia

De la teoría a la implementación: tutoriales en química teórica

1.2. Carácter

Optativa

1.3. Nivel

Máster (MECES 3)

1.4. Curso

2

1.5. Semestre

Segundo semestre

1.6. Número de créditos ECTS

6.0

1.7. Idioma

Inglés

1.8. Requisitos previos

No hay.

1.9. Recomendaciones

No hay.

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	05/07/2021	1/4
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	1/4	

1.10. Requisitos mínimos de asistencia

La asistencia a clases es obligatoria.

1.11. Coordinador/a de la asignatura

Nicolás Suaud (Universidad Paul Sabatier Toulouse III).

<https://autoservicio.uam.es/paginas-blancas/>

1.12. Competencias y resultados del aprendizaje

1.12.1. Competencias

BÁSICAS Y GENERALES

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

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

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

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

TRANSVERSALES

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

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

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

CT05 - Capacidad de razonamiento y reflexión crítica y autocrítica como vía para mejorar el propio proceso de aprendizaje y la generación y desarrollo de ideas en un contexto profesional o de investigación.

ESPECÍFICAS

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

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

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

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

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

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

1.12.2. Resultados de aprendizaje

No aplica.

1.12.3. Objetivos de la asignatura

El objetivo de esta escuela es aprender a implementar la teoría de la química cuántica en el código informático. Por lo tanto, después de una introducción de cada tema, se dedicará mucho tiempo a codificar la teoría en tutoriales prácticos. Los temas incluyen la teoría de Hückel, la teoría de Hartree-Fock, la teoría del DFT, dinámica cuántica y molecular, y magnetismo cuántico.

1.13. Contenidos del programa

1. Teoría e implementación del método Hartree-Fock (HF).
2. Teoría e implementación de métodos basados en DFT.
3. Geometría y topología - construyendo nanopartículas.

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	05/07/2021	2/4
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	2/4	

4. Estudio de superficies de energía potencial - Dinámica molecular.
5. Magnetismo cuántico - el modelo de Heisenberg.
6. Dinámica Cuántica.
7. Estructuras de carbono de baja dimensión - la utilidad de los enfoques simples.

1.14. Referencias de consulta

-

2. Metodologías docentes y tiempo de trabajo del estudiante

2.1. Presencialidad

	#Horas
Porcentaje de actividades presenciales (mínimo 33% del total).	43
Porcentaje de actividades no presenciales.	82

2.2. Relación de actividades formativas

Actividades presenciales	Nº horas
Clases teóricas en aula	20
Prácticas con medios informáticos	20
Actividades de evaluación	3

3. Sistemas de evaluación y porcentaje en la calificación final

3.1. Convocatoria ordinaria

La nota final de la asignatura se basará en: 20% examen final de la asignatura y un 80% correspondiente a la entrega de un informe de ejercicios propuestos por el profesor.

3.1.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Examen final	20
Ejercicios propuestos	80

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	05/07/2021	3/4
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	3/4	

3.2. Convocatoria extraordinaria

La evaluación se basará en la entrega de un informe con los ejercicios propuestos.

3.2.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Ejercicios propuestos.	100
Evaluación continua	0

4. Cronograma orientativo

El curso estará organizado por la Universidad Paul Sabatier Toulouse III.

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	05/07/2021	4/4
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	4/4	