



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE MADRID

31239 - TESIS DE MÁSTER

Información de la asignatura

Código - Nombre: 31239 - TESIS DE MÁSTER

Titulación: 616 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2013)
621 - ESTUDIOS INTERUNIVERSITARIOS MÁSTER
651 - Máster Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelización Computacional
748 - Máster Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelización Computacional
751 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional Europeo
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

Trabajo fin de Máster

1.2. Carácter

616 - Obligatoria
762 - Trabajo fin de máster
651 - Trabajo fin de máster
748 - Trabajo fin de máster
621 - Trabajo fin de máster
751 - Trabajo fin de máster

1.3. Nivel

616 - Máster (MECES 3)
762 - Máster (MECES 3)
651 - Máster (MECES 3)
748 - Máster (MECES 3)
621 - Máster
751 - Máster (MECES 3)

1.4. Curso

751 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional Europeo: 2
651 - Máster Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelización Computacional: 2
621 - ESTUDIOS INTERUNIVERSITARIOS MÁSTER: 1
762 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2021): 2
616 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2013): 2
748 - Máster Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelización Computacional: 2

1.5. Semestre

| | | | | |
|---------------------------------------|--|----------------|------------|-----|
| Código Seguro de Verificación: | | Fecha: | 05/07/2021 | 1/5 |
| Firmado por: | <i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i> | | | |
| Url de Verificación: | | Página: | 1/5 | |

Aual

1.6. Número de créditos ECTS

30.0

1.7. Idioma

English

1.8. Requisitos previos

No hay.

1.9. Recomendaciones

No hay.

1.10. Requisitos mínimos de asistencia

La asistencia a las clases es obligatoria.

1.11. Coordinador/a de la asignatura

Sergio Diaz-Tendero Victoria

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

1.12. Competencias y resultados del aprendizaje

1.12.1. Competencias

Competencias:

BÁSICAS Y GENERALES:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

TRANSVERSALES:

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

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

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

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

ESPECÍFICAS:

| | | | | |
|---------------------------------------|--|----------------|------------|-----|
| Código Seguro de Verificación: | | Fecha: | 05/07/2021 | 2/5 |
| Firmado por: | <i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i> | | | |
| Url de Verificación: | | Página: | 2/5 | |

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

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

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

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

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

CE06 - Es capaz de realizar una contribución a través de una investigación original que amplíe las fronteras del conocimiento en simulación Química, desarrollando un corpus sustancial, que merezca, al menos en parte, la publicación referenciada a nivel nacional. CE09 - El/la estudiante comprende la base de la Mecánica Estadística formulada a partir de las colectividades.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

1.12.2. Resultados de aprendizaje

-

1.12.3. Objetivos de la asignatura

| | | | | |
|---------------------------------------|--|----------------|------------|------------|
| Código Seguro de Verificación: | | Fecha: | 05/07/2021 | 3/5 |
| Firmado por: | <i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i> | | | |
| Url de Verificación: | | Página: | 3/5 | |

1.13. Contenidos del programa

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

1.14. Referencias de consulta

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

2. Metodologías docentes y tiempo de trabajo del estudiante

2.1. Presencialidad

| | #horas |
|---|--------|
| Porcentaje de actividades presenciales (mínimo 33% del total) | 300 |
| Porcentaje de actividades no presenciales | 450 |

2.2. Relación de actividades formativas

| Actividades presenciales | Nº horas |
|-----------------------------------|---|
| Clases teóricas en aula | |
| Seminarios | 46 |
| Clases prácticas en aula | |
| Prácticas clínicas | |
| Prácticas con medios informáticos | |
| Prácticas de campo | |
| Prácticas de laboratorio | |
| Prácticas externas y/o practicum | |
| Trabajos académicamente dirigidos | 4 |
| Tutorías | 20 |
| Actividades de evaluación | |
| Otras | 230 (Estancia en una universidad externa) |

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

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

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

Seguimiento del Trabajo de Fin de Máster.

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

3. Sistemas de evaluación y porcentaje en la calificación final

3.1. Convocatoria ordinaria

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

3.1.1. Relación actividades de evaluación

| Actividad de evaluación | % |
|---|---|
| Examen final (máximo 70% de la calificación final o el porcentaje que figure en la memoria) | |
| Evaluación continua | |

3.2. Convocatoria extraordinaria

| | | | | |
|--------------------------------|--|---------|------------|-----|
| Código Seguro de Verificación: | | Fecha: | 05/07/2021 | 4/5 |
| Firmado por: | <i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i> | | | |
| Url de Verificación: | | Página: | 4/5 | |

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

3.2.1. Relación actividades de evaluación

| Actividad de evaluación | % |
|---|---|
| Examen final (máximo 70% de la calificación final o el porcentaje que figure en la memoria) | |
| Evaluación continua | |

4. Cronograma orientativo

-

| | | | | |
|---------------------------------------|--|----------------|------------|-----|
| Código Seguro de Verificación: | | Fecha: | 05/07/2021 | 5/5 |
| Firmado por: | <i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i> | | | |
| Url de Verificación: | | Página: | 5/5 | |