



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.

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

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

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

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