

**FICHA IDENTIFICATIVA****Datos de la Asignatura**

Código	43998
Nombre	Aplicaciones
Ciclo	Máster
Créditos ECTS	6.0
Curso académico	2022 - 2023

Titulación(es)

Titulación	Centro	Curso	Periodo
2184 - M.U. en Química Teórica y Modelización Computacional 13-V.1	Facultad de Química	2	Anual

Materias

Titulación	Materia	Caracter
2184 - M.U. en Química Teórica y Modelización Computacional 13-V.1	4 - Modelización Avanzada y Aplicaciones	Obligatoria

Coordinación

Nombre	Departamento
SANCHEZ MARIN, JOSE	315 - Química Física
TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO	315 - Química Física

RESUMEN

La edición número 13 del Curso Intensivo del Máster en Química Teórica y Modelización Computacional tendrá lugar en la Universidad de Perugia del 3 al 28 de septiembre 2018.

CONOCIMIENTOS PREVIOS**Relación con otras asignaturas de la misma titulación**

No se han especificado restricciones de matrícula con otras asignaturas del plan de estudios.



Otros tipos de requisitos

No hay requisitos previos

COMPETENCIAS

2184 - M.U. en Química Teórica y Modelización Computacional 13-V.1

- Que los/las estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.
- Que los/las estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios.
- Que los/las estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades.
- Que los/las estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo
- 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.
- Los estudiantes deben ser capaces de fomentar, en contextos académicos y profesionales, el avance tecnológico y científico dentro de una sociedad basada en el conocimiento y en el respeto a: a) los derechos fundamentales y de igualdad de oportunidades entre hombres y mujeres, b) los principios de igualdad de oportunidades y accesibilidad universal de las personas con discapacidad y c) los valores propios de una cultura de paz y de valores democráticos.
- El estudiante demuestra su conocimiento y comprensión de los hechos aplicando conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química Teórica y Modelización Computacional.
- Adquirir una visión global de las distintas aplicaciones de la Química Teórica y modelización en campos de la Química, Bioquímica, Ciencias de Materiales, Astrofísica y Catálisis.
- El estudiante tiene capacidad de generar nuevas ideas.
- El 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.

2193 - M.ErasmMund en Química Teórica y Modelización Computacional

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



- Que los/las estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios.
- Que los/las estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades.
- Que los/las estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo
- 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.
- Los estudiantes deben ser capaces de fomentar, en contextos académicos y profesionales, el avance tecnológico y científico dentro de una sociedad basada en el conocimiento y en el respeto a: a) los derechos fundamentales y de igualdad de oportunidades entre hombres y mujeres, b) los principios de igualdad de oportunidades y accesibilidad universal de las personas con discapacidad y c) los valores propios de una cultura de paz y de valores democráticos.
- El estudiante demuestra su conocimiento y comprensión de los hechos aplicando conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química Teórica y Modelización Computacional.
- Adquirir una visión global de las distintas aplicaciones de la Química Teórica y modelización en campos de la Química, Bioquímica, Ciencias de Materiales, Astrofísica y Catálisis.
- El estudiante tiene capacidad de generar nuevas ideas.
- El 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.

RESULTADOS DE APRENDIZAJE

-- Introducir algunos conceptos básicos relacionados con el modelado cuántico-mecánico de sólidos dentro de las llamadas condiciones de frontera periódica-- Proporcionar una visión general amplia de las principales propiedades de los materiales que pueden ser efectivamente calculados con algoritmos de última generación dentro de la teoría del funcional de la densidad (DFT)-- Conocer algunos conceptos básicos de la cristalografía se recordará para introducir redes directas y recíprocas. La necesidad de condiciones de frontera periódicas para simplificar el problema y el teorema de Bloch-- Para calcular el espectro de fotoabsorción de una serie de moléculas y clústeres metálicos-- Analizar diferentes métodos (basados en el análisis de la densidad de electrones), llevados a cabo en la función de distribución de densidad electrónica estrechamente relacionada con el cuadrado de la función de onda, para obtener información sobre las propiedades del sistema, a través del análisis de la función de onda-- Reconocer y practicar cómo es la financiación de la investigación -- Para una visión general de la química interdisciplinaria "fuera de la tierra" (medio interestelar)



DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS

1. 1.-

- Tendencias y desafíos modernos en computación de alto rendimiento
- Aproximación mecánica cuántica a la ciencia de los materiales. El código CRYSTAL en el trabajo
- Formalismo y aplicaciones de la teoría funcional de la densidad
- Funciones de onda y análisis vinculante
- Modelado de superficie, adsorción y reactividad.
- HABILIDADES DE COMUNICACIÓN - Mirando hacia el futuro: financiación de la investigación, empleo y emprendimiento
- NUEVAS TENDENCIAS EN CIENCIA El desafío de la química en el medio interestelar

VOLUMEN DE TRABAJO

ACTIVIDAD	Horas	% Presencial
Clases de teoría	32,00	100
Seminarios	10,00	100
Elaboración de trabajos individuales	40,00	0
Estudio y trabajo autónomo	44,00	0
Preparación de clases prácticas y de problemas	24,00	0
TOTAL	150,00	

METODOLOGÍA DOCENTE

Lección magistral: El profesor expondrá los contenidos del curso en sesiones presenciales.

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

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



EVALUACIÓN

La nota final de la asignatura se basará en

- 60% realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura.
- 40% discusión en tutorías y/o seminarios sobre los ejercicios, trabajos o prácticas realizados en la asignatura.

REFERENCIAS

Básicas

- 1. R. F. W. Bader, Atoms in Molecules. A Quantum Theory, Clarendon Press, Oxford, 1990.
- 2. A. D. Becke and K. E. Edgecombe, J. Chem. Phys., 1990, 92, 5397-5403.
- 3. A. Savin, R. Nesper, S. Wengert and T. F. Fäsler, Angew. Chem. Int. Ed. Engl., 1997, 36, 1808-1832.
- 4. B. Silvi and A. Savin, Nature, 1994, 371, 683-686.
- 5. A. E. Reed, L. A. Curtiss and F. Weinhold, Chem. Rev., 1988, 88, 899-926.
- 6. M. Alcamí, O. Mó and M. Yáñez, in Molecular Electrostatic Potentials: Concepts and Applications, ed. J. S. Murray and K. Sen, Elsevier, Amsterdam, 1996, vol. 3, pp. 407-456.
- 7. M. D. Sicilia, O. Mo, M. Yanez, J. C. Guillemin, J. F. Gal and P. C. Maria, Eur. J. Mass Spectrom., 2003, 9, 245-255.
- 8. E. R. Johnson, S. Keinan, P. Mori-Sánchez, J. Contreras-García, A. J. Cohen, W. Yang, J. Am. Chem. Soc. 2010, 132(18), 6498-6506.