FICHA IDENTIFICATIVA

Datos de la Asignatura

Código	44004
Nombre	Laboratorio de química teórica aplicada
Ciclo	Máster
Créditos ECTS	5.0
Curso académico	2022 - 2023

Titulación(es)

Titulación	Centro	Curso	Periodo
2184 - Máster Universitario en Química Teórica y Modelización Computacional	Facultad de Química	1	Anual

Materias

Titulación	Materia	Carácter
2184 - Máster Universitario en Química Teórica y Modelización Computacional	5 - Optatividad	Optativa

Coordinación

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

RESUMEN

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.

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.

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 (RD 1393/2007) // RESULTADOS DEL APRENDIZAJE (RD 822/2021)

RESULTADOS DE APRENDIZAJE (RD 1393/2007) // SIN CONTENIDO (RD 822/2021)

1. Introducción a la investigación científica: Búsquedas de bibliografía y presentación de trabajos científicos.

2. Herramientas básicas informáticas: acceso a centros de cálculo, herramientas de visualización, herramientas de representación gráfica y herramientas de programación.

3. Toma de contacto con programas de cálculo dirigidos al estudio del estado fundamental y estados excitados.

4. Afianzar los conceptos de función de onda multiconfiguracional y correlación estática vs. correlación dinámica.

5. Toma de contacto con programas de cálculo dirigidos al estudio de dinámica.

6. Sistemas periódicos: Conceptos físicos básicos

7. Toma de contacto con programas de cálculo dirigidos al estudio de sistemas periódicos.

8. Localización y análisis de información relevante acerca de la función de onda y otras propiedades moleculares a partir de la salida de estos programas.

9. Familiarización con programas de visualización de resultados obtenidos con los programas de cálculo mencionados anteriormente.

DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS

1. Laboratorio

1. Herramientas básicas para el trabajo científico: programas para realizar gráficos (xmgrace), gestores de referencias (Mendeley, BibTeX), preparación de documentos con LaTeX(texto, ecuaciones, figuras, tablas y bibliografía).
2. Breve introducción a la programación en Python.
3. Programas habituales de cálculo en Química Cuántica: Gaussian, Mopac, y Molcas
4. Programas de simulación dinámica: Venus
5. Programas de cálculo de sistemas periódicos: VASP
6. Programas de visualización de resultados: GView, Molden

VOLUMEN DE TRABAJO

ACTIVIDAD	Horas	% Presencial
Clases de teoría	40,00	100
Tutorías regladas	10,00	100
Elaboración de trabajos individuales	30,00	0
Estudio y trabajo autónomo	45,00	0
TOTAL	**125,00**	

METODOLOGÍA DOCENTE

EVALUACIÓN

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 la evaluación de un proyecto de investigación (que se propondrá y dirigirá durante las clases prácticas) englobando los conocimientos adquiridos a lo largo de la asignatura. También se evaluará la participación en las clases prácticas a lo largo del 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. De este porcentaje, el 40% corresponde con la realización del informe crítico y el 20% con las actividades a evaluar en el aula.

- 40% Discusión en tutorías y/o seminarios sobre los ejercicios, trabajos o prácticas realizadas en la asignatura, que podrá ser en forma de exposición oral del informe realizado.

REFERENCIAS

Básicas

- . Consulta de documentación actualizada en línea en lenguajes de programación y aplicaciones: Python: www.python.org
- B. Foreman y E. Frisch, Exploring chemistry with Electronic Structure Methods. 2nd Edition. Gaussian, Inc. Pittsburgh, 1996.
- MOLCAS v. 7.8 Users manual, Lund University, 2012.
- Charles Kittel Introduction to solid state physics
- Neil W. Ashcroft and N. David Mermin Solid state physics
- 1. Mopac manual: http://openmopac.net/manual/
- L. Sun and W. Hase, Born-Oppenheimer Direct Dynamics Classical Trajectory Simulations.
- Neil W. Ashcroft and N. David Mermin Solid state physics
- Gaussian manual www.gaussian.com