

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

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

**Titulación(es)**

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

**Materias**

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

## RESULTADOS DE APRENDIZAJE

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
<b>TOTAL</b>	<b>125,00</b>	

## 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](http://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](http://www.gaussian.com)