

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

Código	44989
Nombre	De la teoría a la implementación: tutoriales en química teórica
Ciclo	Máster
Créditos ECTS	6.0
Curso académico	2022 - 2023

Titulación(es)

Titulación	Centro	Curso	Periodo
2245 - M.ErasmMund en Química Teórica y Modelización Computacional	Facultad de Química	2	Anual

Materias

Titulación	Materia	Caracter
2245 - M.ErasmMund en Química Teórica y Modelización Computacional	4 - Optativas de segundo	Optativa

Coordinación

Nombre	Departamento
TUÑÓN GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO	315 - Química Física

RESUMEN**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



COMPETENCIAS

2245 - 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.
- 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 manejan las técnicas más usuales de programación en física y en química y está familiarizado con las herramientas de cálculo esenciales en estas áreas.
- El estudiante es capaz de desarrollar programas eficientes en Fortran con el fin de utilizar dichas herramientas en su trabajo cotidiano.
- El estudiante entiende los principios básicos de las metodologías "ab initio" y Teoría de los Funcionales de la Densidad.
- 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.
- Conocer 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.
- 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.
- 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.
- El/la estudiante es capaz de adaptarse a diferentes entornos culturales demostrando que responde al cambio con flexibilidad.
- 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.
- El/la estudiante tiene capacidad de generar nuevas ideas a partir de sus propias decisiones.
- El/la estudiante es capaz de discernir entre los diferentes métodos existentes y cómo seleccionar el más adecuado para cada problema.

RESULTADOS DE APRENDIZAJE

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.



DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS

1.

1. Teoría e implementación del método Hartree-Fock (HF).
2. Teoría e implementación de métodos basados en DFT.
3. Geometría y topología - construyendo nanopartículas.
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.

VOLUMEN DE TRABAJO

ACTIVIDAD	Horas	% Presencial
Prácticas en aula informática	20,00	100
Tutorías regladas	10,00	100
Clases de teoría	10,00	100
Seminarios	5,00	100
TOTAL	45,00	

METODOLOGÍA DOCENTE

EVALUACIÓN

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.

Convocatoria extraordinaria

La evaluación se basará en la entrega de un informe con los ejercicios propuestos.

REFERENCIAS