FICHA IDENTIFICATIVA

Datos de la Asignatura

Código	44993
Nombre	Trabajo fin de máster
Ciclo	Máster
Créditos ECTS	30.0
Curso académico	2022 - 2023

Titulación(es)

Titulación	Centro	Curso	Periodo
2245 - Máster Universitario Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelizac. Comput.	Facultad de Química	2	Anual

Materias

Titulación	Materia	Carácter
2245 - Máster Universitario Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelizac. Comput.	6 - Trabajo fin de máster	Trabajo Fin Estudios

RESUMEN

Diseño, planificación y desarrollo de un proyecto de investigación original.

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

2245 - Máster Universitario Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelizac. Comput.

- 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.
- Ampliar y/o adquirir conocimiento de los métodos básicos de la Química Cuántica y evaluar críticamente su aplicabilidad.
- 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.
- Ser capaz de realizar una contribución a través de una investigación original que amplíe las fronteras del conocimiento en simulación Química, desarrollando un corpus sustancial, que merezca, al menos en parte, la publicación referenciada a nivel nacional.
- El estudiante está familiarizado con los postulados fundamentales de la Mecánica Cuántica necesarios para un buen entendimiento de los métodos más comunes utilizados en química cuántica.
- 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 conoce teorías y métodos de cálculo asociados a procesos cinéticos y evalúa críticamente su aplicabilidad al cálculo de constantes de velocidad.
- 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 y evaluar críticamente la aplicabilidad de los métodos avanzados de la Química Cuántica a los sistemas cuasidegenerados, tales como, sistemas con metales de transición o estados excitados (su espectroscopia y reactividad).
- 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.
- Conocer la existencia de técnicas computacionales avanzadas tales como: canalización de instrucciones y datos, procesadores superescalar y multiescalares, operaciones en cadena, plataformas en paralelo, 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 son capaces de trabajar en equipo tanto a nivel multidisciplinar como con sus propios pares respetando el principio de igualdad de hombre y mujeres.
- 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 es organizado en el trabajo demostrando que sabe gestionar el tiempo y los recursos de que dispone.
- 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.
- Maneja las principales fuentes de información científica relacionadas con la Química Teórica y Modelización Computacional, siendo capaz de buscar información relevante en química en páginas web de datos estructurales, de datos experimentales químico físico, en las bases de datos de cálculos moleculares, en bases de datos bibliográficas y en la lectura crítica de trabajos científicos.
- Comprende los fundamentos teóricos y prácticos de técnicas computacionales con las que puede analizar la estructura electrónica, morfológica y estructural de un compuesto e interpreta adecuadamente los resultados.
- Sabe calcular funciones de partición y aplica estadística cuánticas y clásica a los sistemas ideales de interés en Química.

- El/la estudiante posee la base matemática necesaria para el correcto tratamiento de la simetría en átomos, moléculas y sólidos, con énfasis en las posibles aplicaciones.
- El/la estudiante es capaz de discernir entre los diferentes métodos existentes y cómo seleccionar el más adecuado para cada problema.
- Los estudiantes comprenden y manejan las herramientas matemáticas requeridas para el desarrollo de la Química Teórica en sus aspectos fundamentales y sus aplicaciones.

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

DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS

VOLUMEN DE TRABAJO

ACTIVIDAD	Horas	% Presencial
Trabajo fin de Grado/Máster		100
Realización del Trabajo Fin de Máster	450,00	0
Seguimiento i tutorización del Trabajo Fin de Máster	295,00	0
Presentación y defensa del Trabajo Fin de Máster	5,00	0
TOTAL	**750,00**	

METODOLOGÍA DOCENTE

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

Presentaciones orales de temas previamente preparados, incluyendo debate con compañeros y profesores.

Orientación y supervisión en la preparación de informes o memorias escritas.

Seguimiento del Trabajo de Fin de Máster.

Participación activa en tareas que permitan el desarrollo de destrezas comunicativas.

EVALUACIÓN

Convocatoria ordinaria

100% Realización y defensa pública y oral ante un tribunal evaluador del informe escrito sobre el trabajo de investigación original realizado por el estudiante.

Convocatoria extraordinaria

100% Realización y defensa pública y oral ante un tribunal evaluador del informe escrito sobre el trabajo de investigación original realizado por el estudiante.

REFERENCIAS

Básicas

- Lectures suggested by tutor.