



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE MADRID

## 32531 - LABORATORIO DE QUÍMICA TEÓRICA APLICADA

### Información de la asignatura

**Código - Nombre:** 32531 - LABORATORIO DE QUÍMICA TEÓRICA APLICADA

**Titulación:** 616 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2013)  
651 - Máster Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelización Computacional  
748 - Máster Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelización Computacional  
751 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional Europeo  
762 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2021)

**Centro:** 104 - Facultad de Ciencias

**Curso Académico:** 2024/25

### 1. Detalles de la asignatura

#### 1.1. Materia

Laboratorio de Química Teórica Aplicada.

#### 1.2. Carácter

Optativa

#### 1.3. Nivel

Máster (MECES 3)

#### 1.4. Curso

1

#### 1.5. Semestre

Anual

#### 1.6. Número de créditos ECTS

5.0

#### 1.7. Idioma

Inglés

#### 1.8. Requisitos previos

No hay.

#### 1.9. Recomendaciones

No hay.

#### 1.10. Requisitos mínimos de asistencia

<b>Código Seguro de Verificación:</b>		<b>Fecha:</b>	08/07/2024	1/4
<b>Firmado por:</b>	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
<b>Url de Verificación:</b>		<b>Página:</b>	1/4	

La asistencia a las clases es obligatoria.

### 1.11. Coordinador/a de la asignatura

Lara Martínez Fernández - Universidad Autónoma de Madrid.

<https://autoservicio.uam.es/paginas-blancas/>

### 1.12. Competencias y resultados del aprendizaje

#### 1.12.1. Competencias / Resultados del proceso de formación y aprendizaje

##### BÁSICAS Y GENERALES:

CB6 - 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.

CB7 - Que los 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.

CB8 - Que los 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.

CB9 - Que los 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.

CB10 - Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.

CG01 - Los estudiantes son 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.

CG02 - 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.

##### TRANSVERSALES:

CT02 - El/la estudiante es organizado en el trabajo demostrando que sabe gestionar el tiempo y los recursos de que dispone.

CT03 - 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.

#### 1.12.2. 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 cálculos mecano-cuánticos.
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.

#### 1.12.3. Objetivos de la asignatura

-

### 1.13. Contenidos del programa

1. Breve introducción a la programación.
2. Programas habituales de cálculo en Química Cuántica: Gaussian y Openmolcas.
3. Programas de cálculo de sistemas periódicos: Quantum Espresso.
4. Programas de visualización de resultados: GView, Molden.

### 1.14. Referencias de consulta

1. Consulta de documentación actualizada en línea en lenguajes de programación y aplicaciones: Python: [www.python.org](http://www.python.org)
2. J. B. Foreman y E. Frisch, Exploring chemistry with Electronic Structure Methods. 2nd Edition. Gaussian, Inc. Pittsburgh, 1996.

<b>Código Seguro de Verificación:</b>		<b>Fecha:</b>	08/07/2024	2/4
<b>Firmado por:</b>	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
<b>Url de Verificación:</b>		<b>Página:</b>	2/4	

3. MOLCAS v. 7.8 Users' manual, Lund University, 2012.
4. Mopac manual: <http://openmopac.net/manual/>
5. L. Sun and W. Hase, Born-Oppenheimer Direct Dynamics Classical Trajectory Simulations.
6. Charles Kittel Introduction to solid state physics
7. Neil W. Ashcroft and N. David Mermin Solid state physics
8. Gaussian manual [www.gaussian.com](http://www.gaussian.com)

## 2. Metodologías docentes y tiempo de trabajo del estudiante

### 2.1. Presencialidad

	#horas
Porcentaje de actividades presenciales (mínimo 33% del total)	50
Porcentaje de actividades no presenciales	75

### 2.2. Relación de actividades formativas

Actividades presenciales	Nº horas
Clases teóricas en aula	
Seminarios	
Clases prácticas en aula	40
Prácticas clínicas	
Prácticas con medios informáticos	
Prácticas de campo	
Prácticas de laboratorio	
Prácticas externas y/o practicum	
Trabajos académicamente dirigidos	
Tutorías	10
Actividades de evaluación	
Otras	

**Lección Magistral:** El profesor expondrá los contenidos del curso en sesiones presenciales, o, por video conferencia 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 a cuatro 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 (<https://posgrado.uam.es>). 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.

## 3. Sistemas de evaluación y porcentaje en la calificación final

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

#### 3.1.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Examen final (máximo 70% de la calificación final o el porcentaje que figure en la memoria)	60
Evaluación continua	40

### 3.2. Convocatoria extraordinaria

Se realizará un examen final único que será de carácter teórico y que abarcará los contenidos de toda la asignatura. La puntuación en la convocatoria extraordinaria se realizará en base a los siguientes porcentajes:

<b>Código Seguro de Verificación:</b>		<b>Fecha:</b>	08/07/2024	3/4
<b>Firmado por:</b>	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
<b>Url de Verificación:</b>		<b>Página:</b>	3/4	

- 60% Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura,
- 40 % Actividades a evaluar en el aula.

### 3.2.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Examen final (máximo 70% de la calificación final o el porcentaje que figure en la memoria)	60
Evaluación continua	40

### 4. Cronograma orientativo

Bloque temático	Clase
Introducción a la investigación científica	1
Herramientas informáticas	2 y 12
Programas de cálculo en Química Cuántica: Gaussian, Mopac	3
Programas de cálculo en Química Cuántica: Molcas	4, 5 y 6
Programas de cálculo de dinámica: Venus	7 y 8
Programas de cálculo de sistemas periódicos: VASP	9, 10 y 11

Por favor, comprobar el horario oficial publicado en la página web del Máster.

<b>Código Seguro de Verificación:</b>		<b>Fecha:</b>	08/07/2024	<b>4/4</b>
<b>Firmado por:</b>	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
<b>Url de Verificación:</b>		<b>Página:</b>	4/4	