



Asignatura: Laboratorio de Química Teórica Aplicada
Código: 32531
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

1. ASIGNATURA / COURSE TITLE

Laboratorio de Química Teórica Aplicada / [Applied Theoretical Chemistry Laboratory](#)

1.1. Código / Course number

32531

1.2. Materia / Content area

Módulo 3. Optatividad / [Module 3. Optional courses](#)

1.3. Tipo / Course type

Optativa / [Elective subject](#)

1.4. Nivel / Course level

Máster / [Master](#)

1.5. Curso / Year

1º / 1st

1.6. Semestre / Semester

Anual / [Annual](#)

1.7. Número de créditos / Credit allotment

5 créditos ECTS / [5 ECTS credits](#)

1.8. Requisitos previos / Prerequisites

No hay requisitos previos / [There are no previous prerequisites](#)

1.9. Requisitos mínimos de asistencia a las sesiones presenciales / Minimum attendance requirement

La asistencia a las clases es obligatoria / [Attendance is mandatory](#)



Asignatura: Laboratorio de Química Teórica Aplicada
Código: 32531
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

1.10. Datos del equipo docente / Faculty data

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Ana Martín Sómer (Coordinadora/Coordinator)
Departamento de Química / **Department of Chemistry**
Facultad de Ciencias / **Faculty of Sciences**
Universidad Autónoma de Madrid
Despacho - Módulo / **Office - Module**: 502 - Módulo 13
Teléfono / **Phone**: 91 497 24 97
Correo electrónico/**Email**: ana.somer@uam.es
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: concertar cita por correo electrónico

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Cristina Díaz Blanco
Departamento de Química / **Department of Chemistry**
Facultad de Ciencias / **Faculty of Sciences**
Universidad Autónoma de Madrid
Despacho - Módulo / **Office - Module**: 305A
Teléfono / **Phone**: 91 497 5620
Correo electrónico/**Email**: cristina.diaz@uam.es
Página web/**Website**: <http://web.uam.es/departamentos/ciencias/quimica/cristina/>
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: concertar cita por correo electrónico

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Etienne Plesiat
Departamento de Química / **Department of Chemistry**
Facultad de Ciencias / **Faculty of Sciences**
Universidad Autónoma de Madrid
Correo electrónico/**Email**: etienne.plesiat@uam.es
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: concertar cita por correo electrónico

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Lara Martínez Fernández
Departamento de Química / **Department of Chemistry**
Facultad de Ciencias / **Faculty of Sciences**
Universidad Autónoma de Madrid
Correo electrónico/**Email**: lara.martfernandez@gmail.com
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: concertar cita por correo electrónico

1.11. Objetivos del curso / Course objectives

1.11a. Resultados del 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.



Asignatura: Laboratorio de Química Teórica Aplicada
Código: 32531
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

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.

1.11b. Competencias

Estos resultados del aprendizaje contribuyen a la adquisición de las siguientes competencias del curso:

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.



Asignatura: Laboratorio de Química Teórica Aplicada
Código: 32531
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

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.

1.11a. Learning objectives

1. Introduction to scientific research: literature searches and presentation of scientific documents.
2. Basic informatic tools: visualization tools, graphing tools and math tools.
3. Introduction to quantum chemical packages aiming at the description of the ground and excited states.
4. Analysis of the information relevant to the wavefunction and other properties from the output of these programs.
5. Reinforce the concepts of static and dynamic correlation.
6. Get familiar with molecular orbital visualization programs
7. Periodic systems: basic physical concepts
8. Get familiar with periodic boundary conditions codes

1.11b. Skills

These learning objectives contribute to provide the following skills for the students:

BASIC AND GENERAL SKILLS

CB6 - Students possess and understand knowledge that provides a basis or opportunity to be original in the development and/or application of ideas, often in a research context.

CB7 - Students know how to apply the acquired knowledge and their problem solving capacity in new or little known environments within broader (or multidisciplinary) contexts related to their area of study.

CB8 - Students are able to integrate knowledge and face the complexity of making judgments from information that, incomplete or limited, includes reflections on social and ethical responsibilities linked to the application of their knowledge and judgments.



Asignatura: Laboratorio de Química Teórica Aplicada
Código: 32531
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

CB9 - Students know how to communicate their conclusions and the knowledge and reasons that support them to specialized and non-specialized audiences in a clear and unambiguous way.

CB10 - Students possess the learning skills that allow them to continue studying in way that will be self-directed or autonomous.

CG01 - Students are able to foster, in academic and professional contexts, technological and scientific progress within a society based on knowledge and respect for: a) fundamental rights and equal opportunities between men and women, b) The principles of equal opportunities and universal accessibility for persons with disabilities, and c) the values of a culture of peace and democratic values.

CG02 - Students are able to solve problems and make decisions of any kind under the commitment to the defense and practice of equality policies.

CROSS-COMPREHENSIVE SKILLS

CT02 - Students are organized at work demonstrating that they know how to manage their time and resources.

CT03 - Students have the ability of analyze and synthesize in such a way that they can understand, interpret and evaluate the relevant information by assuming with responsibility their own learning or, in the future, the identification of professional exits and employment fields

1.12. Contenidos del programa / Course contents

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
-
1. Basic tools for scientific work: : plotting tools (xmgrace), reference managers (Mendeley, BibTeX), document preparation with LaTeX (text, equations, figures, tables and bibliography) .
 2. Brief introduction to Python programing.
 3. Introduction to conventional quantum chemistry programs: Gaussian, Mopac and Molcas
 4. Programs for dynamics simulations: Venus
 5. Periodic boundary conditions codes: VASP
 6. Programs for result visualization: Gview, Molden.



Asignatura: Laboratorio de Química Teórica Aplicada
Código: 32531
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

1.13. Referencias de consulta / **Course bibliography**

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

2. Métodos docentes / **Teaching methodology**

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.

Lecture: The Professor will deliver face-to-face, or, online video lectures about the theoretical contents of the course during two-hour sessions. The presentations will be based on the different materials available at the Moodle platform.

Teaching in computer room. Teaching will be conducted in a computer room. The classes, in sessions from two to four hours, will include a brief theoretical introduction, in which the teacher will present the basic concepts, followed by practical applications, in which the student will learn through the resolution of practical examples.



Asignatura: Laboratorio de Química Teórica Aplicada
 Código: 32531
 Centro: Facultad de Ciencias
 Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
 Nivel: Máster
 Tipo: Formación Optativa
 N° de créditos: 5 ECTS

Network teaching: All the tools available at the Moodle website (<https://posgrado.uam.es>) will be used (uploading of teaching materials, utilization of work team strategies, wiki, blogs, e-mail, etc.).

Tutoring sessions: The professor can organize either individual or group tutoring sessions about particular topics and questions raised by students.

3. Tiempo de trabajo del estudiante / Student workload

Presencial:

Clases prácticas en aula virtual40 horas
 Tutorías.....10 horas

No Presencial:

Estudio autónomo individual o en grupo.....45 horas
 Elaboración de una memoria con resultados obtenidos en las prácticas30 horas

TOTAL (5 ECTS * 25 horas/ECTS).....125 horas

Contact hours:

Practical lessons in virtual classroom40 hours
 Tutoring.....10 hours

Independent study hours:

self-study or group study45 hours
 Elaboration of a memory based on the practical results.....30 hours

TOTAL (5 ECTS * 25 hours/ECTS).....125 hours

4. Métodos de evaluación y porcentaje en la calificación final / Evaluation procedures and weight of components in the final grade

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:



Asignatura: Laboratorio de Química Teórica Aplicada
Código: 32531
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

- 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.

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:

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

Ordinary assessment

The knowledge acquired by the student will be evaluated along the course. The educational model to follow will emphasize a continuous effort and advance in training and learning.

The final student mark will be based on evaluation of a research project (proposed and supervised during in-person lessons) covering the knowledge acquired throughout the course. Class participation will also be evaluated. The next criteria will be followed for evaluation:

- 60% A report of the practices or exercises related to the subject. Of this percentage, 40% corresponds to the completion of the report and 20% classroom activities.
- 40% Discussion about the exercises, works of practices carried out in the subject, which may be in the form of an oral presentation of the report made.

Extraordinary assessment

The student will have to face a final exam, including both theory and practical exercises. The student mark will be obtained from:

- 60% from the student report,
- 40% from classroom activities



Asignatura: Laboratorio de Química Teórica Aplicada
 Código: 32531
 Centro: Facultad de Ciencias
 Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
 Nivel: Máster
 Tipo: Formación Optativa
 N° de créditos: 5 ECTS

5. Cronograma* / **Course calendar**

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.
 Please, check the official schedule posted on the master website.

*Este cronograma tiene carácter orientativo

*This course calendar is orientative