



Asignatura: Aplicaciones
Código: 31238
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 6 ECTS

1. ASIGNATURA / **COURSE TITLE**

Aplicaciones / [Applications](#)

1.1. Código / **Course number**

31238

1.2. Materia / **Content area**

Módulo 5. Modelización avanzada y aplicaciones / [Module 5. Advanced modelling and applications](#)

1.3. Tipo / **Course type**

Obligatoria / [Compulsory subject](#)

1.4. Nivel / **Course level**

Máster / [Master](#)

1.5. Curso / **Year**

2º / [2nd](#)

1.6. Semestre / **Semester**

1º / [1st](#)

1.7. Número de créditos / **Credit allotment**

6 créditos ECTS / [6 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: Aplicaciones
Código: 31238
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 6 ECTS

1.10. Datos del equipo docente / Faculty data

Docente(s) / [Lecturer\(s\)](#): Osvaldo Gervasi
Universidad de Perugia / [University of Perugia](#)

Docente(s) / [Lecturer\(s\)](#): Jefferson Maul
Universidad de Turín / [University of Turin](#)

Docente(s) / [Lecturer\(s\)](#): Alessandro Erba
Universidad de Turín / [University of Turin](#)

Docente(s) / [Lecturer\(s\)](#): Mauro Stener
Universitat de Trieste / [University of Trieste](#)

Docente(s) / [Lecturer\(s\)](#): Manuel Yáñez
Universidad Autónoma de Madrid / [Autonomous University of Madrid](#)

Docente(s) / [Lecturer\(s\)](#): Albert Rimola
Universidad Autónoma de Barcelona / [Autonomous University of Barcelona](#)

Docente(s) / [Lecturer\(s\)](#): Antonio Laganà
Master-up srl

Docente(s) / [Lecturer\(s\)](#): Cecilia Ceccarelli
Institut de Planétologie et d'Astrophysique de Grenoble

1.11. Objetivos del curso / Course objectives

1.11a. Resultados del aprendizaje

- Introducir algunos conceptos básicos relacionados con el modelado cuántico-mecánico de sólidos dentro de las llamadas condiciones de frontera periódica
- Proporcionar una visión general amplia de las principales propiedades de los materiales que pueden ser efectivamente calculados con algoritmos de última generación dentro de la teoría del funcional de la densidad (DFT)
- Conocer algunos conceptos básicos de la cristalografía se recordará para introducir redes directas y recíprocas. La necesidad de condiciones de frontera periódicas para simplificar el problema y el teorema de Bloch
- Para calcular el espectro de fotoabsorción de una serie de moléculas y clústeres metálicos
- Analizar diferentes métodos (basados en el análisis de la densidad de electrones), llevados a cabo en la función de distribución de densidad electrónica estrechamente



Asignatura: Aplicaciones
Código: 31238
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 6 ECTS

relacionada con el cuadrado de la función de onda, para obtener información sobre las propiedades del sistema, a través del análisis de la función de onda

-- Reconocer y practicar cómo es la financiación de la investigación

-- Para una visión general de la química interdisciplinaria "fuera de la tierra" (medio interestelar)

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.

CG04 - 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.



Asignatura: Aplicaciones
Código: 31238
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 6 ECTS

TRANSVERSALES

CT01 - El/la estudiante es capaz de adaptarse a diferentes entornos culturales demostrando que responde al cambio con flexibilidad.

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.

CT04 - El/la estudiante tiene capacidad de generar nuevas ideas a partir de sus propias decisiones.

ESPECÍFICAS

CE01 - Los estudiantes demuestran su conocimiento y comprensión de los hechos aplicando conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química Teórica y Modelización Computacional.

CE03 - Adquiere 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.

1.11a. Learning objectives

-- To introduce some basic concepts related to the quantum-mechanical modelling of solids within so-called periodic-boundary conditions

-- To provide a broad overview of the main properties of materials that can be effectively computed with state-of-the-art algorithms within the density functional theory (DFT)

--- To know some basic concepts of crystallography will be recalled to introduce direct and reciprocal lattices. The need for periodic-boundary conditions to simplify the problem and the Bloch theorem

--To calculate the photoabsorption spectrum of a series of molecules and metal clusters.

-- To analyze different methods (based on the analysis of the electron density), carried out on the electron density distribution function closely related to the square of the wavefunction, to get information about the properties of the system, through the analysis of the wavefunction

- Recognize and practice how research funding and a job.

--To overview the interdisciplinary chemistry “outside the earth” (interstellar medium)



Asignatura: Aplicaciones
Código: 31238
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 6 ECTS

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.

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 a 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.

CG04 - Students develop a critical thinking and reasoning and know how to communicate them in an egalitarian and non-sexist way both in oral and written form, in their own language and in a foreign language.

CROSS-COMPREHENSIVE SKILLS

CT01 - Students are able to adapt their selves to different cultural environments by demonstrating that they are able to respond to change with flexibility.

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.

CT04 - Students are able to generate new ideas based on their own decisions.



Asignatura: Aplicaciones
Código: 31238
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 6 ECTS

SPECIFIC SKILLS

CE01- Students demonstrate their knowledge and understanding of the facts applying concepts, principles and theories related to the Theoretical Chemistry and Computational Modeling.

CE03 - Students acquire an overview of the different applications of the Theoretical Chemistry and modeling in the fields of Chemistry, Biochemistry, Materials Sciences, Astrophysics and Catalysis.

1.12. Contenidos del programa / Course contents

- Tendencias y desafíos modernos en computación de alto rendimiento
- Aproximación mecánica cuántica a la ciencia de los materiales. El código CRYSTAL en el trabajo
- Formalismo y aplicaciones de la teoría funcional de la densidad
- Funciones de onda y análisis vinculante
- Modelado de superficie, adsorción y reactividad.
- HABILIDADES DE COMUNICACIÓN - Mirando hacia el futuro: financiación de la investigación, empleo y emprendimiento
- NUEVAS TENDENCIAS EN CIENCIA - El desafío de la química en el medio interestelar

- Modern Trends and Challenges in High-performance/high-throughput Computing.
- Quantum Mechanical approach to Materials Science. The CRYSTAL code at work.
- Density Functional Theory Formalism and Applications.
- Wavefunctions and binding analysis.

- Surface Modelling, Adsorption and Reactivity.

- COMMUNICATION SKILLS - Looking ahead: research funding, jobs and entrepreneurship

- NEW TRENDS IN SCIENCE - The challenging rich chemistry in the interstellar medium



Asignatura: Aplicaciones
Código: 31238
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 6 ECTS

1.13. Referencias de consulta / Course bibliography

1. R. F. W. Bader, *Atoms in Molecules. A Quantum Theory*, Clarendon Press, Oxford, 1990.
2. A. D. Becke and K. E. Edgecombe, *J. Chem. Phys.*, 1990, 92, 5397-5403.
3. A. Savin, R. Nesper, S. Wengert and T. F. Fäsler, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.*, 1997, 36, 1808-1832.
4. B. Silvi and A. Savin, *Nature*, 1994, 371, 683-686.
5. A. E. Reed, L. A. Curtiss and F. Weinhold, *Chem. Rev.*, 1988, 88, 899-926.
6. M. Alcamí, O. Mó and M. Yáñez, in *Molecular Electrostatic Potentials: Concepts and Applications*, ed. J. S. Murray and K. Sen, Elsevier, Amsterdam, 1996, vol. 3, pp. 407-456.
7. M. D. Sicilia, O. Mo, M. Yanez, J. C. Guillemin, J. F. Gal and P. C. Maria, *Eur. J. Mass Spectrom.*, 2003, 9, 245-255.
8. E. R. Johnson, S. Keinan, P. Mori-Sánchez, J. Contreras-García, A. J. Cohen, W. Yang, *J. Am. Chem. Soc.* 2010, 132(18), 6498-6506.

2. Métodos docentes / Teaching methodology

Lección magistral: El profesor expondrá los contenidos del curso en sesiones presenciales.

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

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

Tutorías. El profesor realizará tutorías individuales o con grupos reducidos sobre cuestiones puntuales que los estudiantes puedan plantear.



Asignatura: Aplicaciones
 Código: 31238
 Centro: Facultad de Ciencias
 Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
 Nivel: Máster
 Tipo: Formación Obligatoria
 N° de créditos: 6 ECTS

Lecture: The Professor will deliver lectures about the theoretical contents of the course.

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.).

Seminars: The Professor and the students will discuss the results being obtained, the potential problems and difficulties in using the various methodologies as well as to supervise the preparation of the required reports.

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 teóricas..... 32 horas
 Seminarios..... 10 horas

No Presencial:

Estudio autónomo individual o en grupo..... 44 horas
 Preparación de seminarios..... 24 horas
 Elaboración de una memoria con ejercicios planteados en clase.....40 horas

TOTAL (6 ECTS * 25 horas/ECTS).....150 horas

Contact hours:

Theoretical lessons..... 32 hours
 Seminars..... 10 hours

Independent study hours:

Self-study or group study 44 hours
 Preparation of seminars, assigned tasks and study..... 24 hours
 Elaboration of a memory based on the exercises proposed in class..... 40 hours

TOTAL (6 ECTS * 25 hours/ECTS)..... 150 hours



Asignatura: Aplicaciones
Código: 31238
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 6 ECTS

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

La nota final de la asignatura se basará en

- 60% realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura.
- 40% discusión en tutorías y/o seminarios sobre los ejercicios, trabajos o prácticas realizados en la asignatura.

The next criteria will be followed for assessment of student exercises:

- 60% Elaboration of a memory based on the exercises proposed in class.
- 40% Discussions between the student and professor in tutoring sessions and seminars about the exercises proposed in class.

5. Cronograma / Course calendar

La edición número 13 del Curso Intensivo del Máster en Química Teórica y Modelización Computacional tendrá lugar en la Università degli Studi di Perugia (Italia) del 3 al 28 de septiembre de 2018.

Información del curso, conferencias y horario en:

<http://www.chm.unipg.it/chimgen/mb/theo2//TCCM2018/EM-TCCM2018/EM-TCCM/Welcome.html>

The 13th edition of the Intensive Course of the Master in Theoretical Chemistry and Computational Modelling will be organized at the Università degli Studi di Perugia (Italy) from 3rd to 28th September 2018.

Further information of the Intensive Course, lectures, schedule on:

<http://www.chm.unipg.it/chimgen/mb/theo2//TCCM2018/EM-TCCM2018/EM-TCCM/Welcome.html>