



Asignatura: Trabajo fin de Máster  
Código: 31239  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 30 ECTS

## 1. ASIGNATURA / COURSE TITLE

Trabajo fin de Máster / [Master Thesis](#)

### 1.1. Código / Course number

31239

### 1.2. Materia / Content area

Módulo 6. Trabajo de Máster / [Module 6. Master Thesis](#)

### 1.3. Tipo / Course type

Obligatoria / [Compulsory subject](#)

### 1.4. Nivel / Course level

Máster / [Master](#)

### 1.5. Curso / Year

2º / [2<sup>nd</sup>](#)

### 1.6. Semestre / Semester

2º / [2<sup>nd</sup>](#)

### 1.7. Número de créditos / Credit allotment

30 créditos ECTS / [30 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: Trabajo fin de Máster  
Código: 31239  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 30 ECTS

## 1.10. Datos del equipo docente / Faculty data

El director de Trabajo de Fin de Máster del alumno.

[The tutor assigned to the student.](#)

## 1.11. Objetivos del curso / Course objectives

Competencias

### 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.

CG03 - 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.



Asignatura: Trabajo fin de Máster  
Código: 31239  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 30 ECTS

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.

#### **TRANSVERSALES**

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

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.

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.

CE02 - Amplía y/o adquiere conocimiento de los métodos básicos de la Química Cuántica y evalúa críticamente su aplicabilidad.

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.

CE04 - 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.

CE05 - Manejar 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 físicos, en bases de datos de cálculos moleculares, en base de datos bibliográficas científicas y en la lectura crítica de trabajos científicos.

CE06 - Es 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.



Asignatura: Trabajo fin de Máster  
Código: 31239  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 30 ECTS

CE09 - El/la estudiante comprende la base de la Mecánica Estadística formulada a partir de las colectividades.

CE10 - Sabe calcular funciones de partición y aplica estadística cuántica y clásica a los sistemas ideales de interés en Química.

CE11 - 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.

CE12 - Está familiarizado con los postulados fundamentales de la Mecánica Cuántica necesarios para un buen entendimiento de los métodos más comunes utilizados en química cuántica.

CE13 - 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.

CE14 - Es capaz de desarrollar programas eficientes en Fortran con el fin de utilizar dichas herramientas en su trabajo cotidiano.

CE15 - Entiende los principios básicos de las metodologías "ab initio" y Teoría de los Funcionales de la Densidad.

CE16 - El/la estudiante es capaz de discernir entre los diferentes métodos existentes y cómo seleccionar el más adecuado para cada problema.

CE17 - Los estudiantes comprenden y manejan las herramientas matemáticas requeridas para el desarrollo de la Química Teórica en sus aspectos fundamentales y sus aplicaciones.

CE18 - Conoce teorías y métodos de cálculo asociados a procesos cinéticos y evalúa críticamente su aplicabilidad al cálculo de constantes de velocidad.

CE19 - El/la 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.

CE20 - Conoce y evalúa 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).

CE21 - Conoce 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.



Asignatura: Trabajo fin de Máster  
Código: 31239  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 30 ECTS

CE22 - Conoce la existencia de técnicas computacionales avanzadas tales como: canalización de instrucciones y datos, procesadores superescalar y multiescalares, operaciones en cadena, plataformas en paralelo, etc.

Las competencias específicas entre CE23-CE28, están asociadas al módulo optativo. Ellas son:

CE23 - Los estudiantes tienen conocimientos tanto a nivel de usuario como de administrador de sistemas complejos de cálculo basados en UNIX/Linux. Esto incluye las operaciones cotidianas, seguridad, y también programación de Shell scripts para automatizar tareas con el objetivo de mantener un sistema de cálculo de complejidad media operativo con alta disponibilidad.

CE24 - Conoce los fundamentos de los láseres y está familiarizado con la resolución de problemas dependientes del tiempo y el tratamiento de estados del continuo.

CE25 - Los estudiantes adquieren los conocimientos prácticos necesarios para llevar a cabo estudios en sistemas bioquímicos utilizando simulaciones computacionales.

CE26 - Los estudiantes saben relacionar observaciones macroscópicas llevadas a cabo dentro del campo de la Cinética Química con las colisiones individuales que tienen lugar a nivel molecular.

CE27 - Los estudiantes conocen los fundamentos de los métodos utilizados para el tratamiento de estados excitados y son capaces de manejar los programas de uso más frecuente para el tratamiento de estados excitados.

CE28 - Proporcionar la metodología básica para el tratamiento de sistemas periódicos, cristales y polímeros.

## Skills

### 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: Trabajo fin de Máster  
Código: 31239  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 30 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 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.

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

CG03 - Students are able to work as a team both at multidisciplinary level and with their own peers respecting the principle of equality of men and women.

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.

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.

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

#### **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.

CE02 - Students broaden and/or acquire knowledge of the basic methods of Quantum Chemistry and evaluate its applicability in a critical way.



Asignatura: Trabajo fin de Máster  
Código: 31239  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 30 ECTS

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.

CE04 - Students understand the theoretical and practical bases of computational techniques with which they can analyze the electronic, morphological and structural structure of a compound and interpret the results adequately.

CE05 - Students have the ability to handle the main sources of scientific information related to Theoretical Chemistry and Computational Modeling. They are able to search for relevant information in web pages of structural data, physical chemical experimental data, databases of molecular calculations, databases of scientific bibliography and scientific works.

CE06 - Students are able to make a contribution through an original research that extends the frontiers of knowledge in Chemical simulation, developing a substantial corpus that deserves, at least in part, the publication referenced at national level.

CE09 - Students understand the basis of Statistical Mechanics formulated from the collectivities.

CE10 - Students know how to calculate partition functions and apply quantum and classical statistics to the ideal systems of interest in Chemistry.

CE11 - Students possess the necessary mathematical basis for the correct treatment of the symmetry in atoms, molecules and solids, with emphasis in the possible applications.

CE12 - Students are familiar with the fundamental postulates of Quantum Mechanics necessary for a good understanding of the most common methods used in quantum chemistry.

CE13 - Students handle the most common programming techniques in physics and chemistry and are familiar with the essential computational tools in these areas.

CE14 - Students are able to develop efficient programs in FORTRAN in order to use such tools in their daily work.

CE15 - Students understand the basic principles of "ab initio" methodologies and Density Functional Theory.

CE16 - Students are able to discern between the different existing methods and know how to select the most appropriate method for each problem.

CE17 - Students understand and manage the mathematical tools required for the development of theoretical chemistry both in fundamental aspects and applications.

CE18 - Students know theories and methods of calculation associated with kinetic processes and evaluate its applicability to the calculation of speed constants.



Asignatura: Trabajo fin de Máster  
Código: 31239  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 30 ECTS

CE19 - Student are familiar with computational techniques which, based on mechanics and molecular dynamics, are the basis for designing molecules of interest in fields such as pharmacology, petrochemistry, etc.

CE20 - Students know and critically evaluate the applicability of advanced methods of quantum chemistry to quasi-generated systems, such as systems with transition metals or excited states (their spectroscopy and reactivity).

CE21 - Students know the theories and calculation methods for the study of solids and surfaces. Critical evaluation of its applicability to problems of catalysis, magnetism, conductivity, etc.

CE22 - Students know the existence of advanced computational techniques such as instruction and data channeling, superscalar and multiscalar processors, chain operations, parallel platforms, etc.

Specific skills from CE23 to CE28 are related to the optional courses module as follows:

CE23 - Students have both user-level and administrator-level knowledge of complex UNIX / Linux based computing systems. This includes day-to-day operations, security, and also scheduling Shell scripts to automate tasks with the goal of maintaining an operating system complexity calculation system with high availability.

CE24 - Students know the fundamentals of lasers and are familiar with the resolution of time-dependent problems and the treatment of states of the continuum.

CE25 - Students acquire the practical knowledge necessary to carry out studies in biochemical systems using computer simulations.

CE26 - Students are able to relate macroscopic observations carried out within the field of Chemical Kinetics with individual collisions taking place at the molecular level.

CE27 - Students are familiar with the fundamentals of the methods used to treat excited states and are able to handle the most frequently used programs for the treatment of excited states.

CE28 - Provide basic methodology for the treatment of periodic systems, crystals and polymers.

## 1.12. Contenidos del programa / Course contents

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





Asignatura: Trabajo fin de Máster  
Código: 31239  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 30 ECTS

Design, planning and development of an original research project.

### 1.13. Referencias de consulta / Course bibliography

Referencias bibliográficas sugeridas por el director de Trabajo de Fin de Máster.

Lectures suggested by tutor.

## 2. Métodos docentes / Teaching methodology

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.

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.

Oral presentations of pre-prepared topics, including discussions with other students and professors.

Guidance and supervision in the preparation of reports.

Monitoring Master Thesis.

Active participation in tasks that allow the development of communication skills.

## 3. Tiempo de trabajo del estudiante / Student workload

### Presencial:

Estancia en una universidad externa.....	230 horas
Tutorías.....	20 horas
Seminarios.....	46 horas
Exposición pública de trabajos.....	4 horas



Asignatura: Trabajo fin de Máster  
Código: 31239  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 30 ECTS

**No Presencial:**

Estudio autónomo individual o en grupo.....380 horas  
Búsqueda bibliográfica y análisis de trabajos..... 10 horas  
Elaboración de una memoria con resultados del TFM..... 60 horas

TOTAL (30 ECTS \* 25 horas/ECTS)..... 750 horas

**Contact hours:**

Stay in a foreign university ..... 230 hours  
Tutoring sessions..... 20 hours  
Seminars..... 46 hours  
Public presentation of works..... 4 hours

**Independent study hours:**

Self-study or group study..... 380 hours  
Bibliography search and analysis work..... 10 hours  
Elaboration of a memory based on Master Thesis results..... 60 hours

TOTAL (30 ECTS \* 25 hours/ECTS)..... 750 hours

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

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

100% Making of a written report about an original research work done by the student and public and oral defence of it before a court evaluator.