

IMPRESO SOLICITUD PARA MODIFICACIÓN DE TÍTULOS OFICIALES

1. DATOS DE LA UNIVERSIDAD, CENTRO Y TÍTULO QUE PRESENTA LA SOLICITUD

De conformidad con el Real Decreto 1393/2007, por el que se establece la ordenación de las Enseñanzas Universitarias Oficiales

UNIVERSIDAD SOLICITANTE	CENTRO	CÓDIGO CENTRO
Universidad Autónoma de Madrid	Facultad de Ciencias	28027060
NIVEL	DENOMINACIÓN CORTA	
Máster	Química Teórica y Modelización Computacional	
DENOMINACIÓN ESPECÍFICA		
Máster Universitario en Química Teórica y Modelización Computacional por la Universidad Autónoma de Madrid; la Universidad de Barcelona; la Universidad de Cantabria; la Universidad de Extremadura; la Universidad de Murcia; la Universidad de Oviedo; la Universidad de Salamanca; la Universidad de Santiago de Compostela; la Universidad de Valladolid; la Universidad de Vigo; la Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea; la Universidad Jaume I de Castellón; la Universitat de les Illes Balears y la Universitat de València (Estudi General)		
RAMA DE CONOCIMIENTO	CONJUNTO	
Ciencias	Nacional	
CONVENIO		
CONVENIO DE COLABORACIÓN ENTRE LAS UNIVERSIDADES PARTICIPANTES PARA LA ORGANIZACIÓN Y DESARROLLO DE LAS ENSEÑANZAS CONJUNTAS CONDUCENTES A LA OBTENCIÓN DEL TÍTULO DE MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA TEÓRICA Y MODELIZACIÓN COMPUTACIONAL		
UNIVERSIDADES PARTICIPANTES	CENTRO	CÓDIGO CENTRO
Universidad de Extremadura	Facultad de Ciencias	06005329
Universitat de les Illes Balears	Centro de Estudios de Postgrado	07008971
Universidad de Barcelona	Facultad de Química	08032971
Universidad de Murcia	Facultad de Química	30010218
Universidad de Salamanca	Facultad de Ciencias Químicas	37008618
Universitat de València (Estudi General)	Instituto Universitario de Ciencia Molecular	46035291
Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea	Facultad de Química	20006274
	Escuela de Doctorado de la UPV/EHU	48012838
Universidad de Vigo	Facultad de Química	36020556
Universidad Jaume I de Castellón	Escuela Superior de Tecnología y Ciencias Experimentales	12004990
Universidad de Valladolid	Facultad de Ciencias	47005668
Universidad de Cantabria	Facultad de Ciencias	39011359
Universidad de Oviedo	Centro Internacional de Postgrado	33024502
Universidad de Santiago de Compostela	Facultad de Química	15020271
HABILITA PARA EL EJERCICIO DE PROFESIONES REGULADAS	NORMA HABILITACIÓN	
No		
SOLICITANTE		
NOMBRE Y APELLIDOS	CARGO	
Manuel Alcamí Pertejo	Catedrático de Química Física. Universidad Autónoma de Madrid	



Tipo Documento		Número Documento	
NIF		05384563X	
REPRESENTANTE LEGAL			
NOMBRE Y APELLIDOS		CARGO	
JUAN ANTONIO HUERTAS MARTINEZ		Vicerrector de Docencia, Innovación Educativa y Calidad	
Tipo Documento		Número Documento	
NIF		05255176K	
RESPONSABLE DEL TÍTULO			
NOMBRE Y APELLIDOS		CARGO	
José María Carrascosa Baeza		Decano de la Facultad de Ciencias de la Universidad Autónoma de Madrid	
Tipo Documento		Número Documento	
NIF		05214426G	
2. DIRECCIÓN A EFECTOS DE NOTIFICACIÓN			
A los efectos de la práctica de la NOTIFICACIÓN de todos los procedimientos relativos a la presente solicitud, las comunicaciones se dirigirán a la dirección que figure en el presente apartado.			
DOMICILIO	CÓDIGO POSTAL	MUNICIPIO	TELÉFONO
C/ Einstein, 1. Edificio Rectorado. Ciudad Universitaria de Cantoblanco	28049	Madrid	638090858
E-MAIL	PROVINCIA	FAX	
juanantonio.huertas@uam.es	Madrid	914973970	
3. PROTECCIÓN DE DATOS PERSONALES			
De acuerdo con lo previsto en la Ley Orgánica 5/1999 de 13 de diciembre, de Protección de Datos de Carácter Personal, se informa que los datos solicitados en este impreso son necesarios para la tramitación de la solicitud y podrán ser objeto de tratamiento automatizado. La responsabilidad del fichero automatizado corresponde al Consejo de Universidades. Los solicitantes, como cedentes de los datos podrán ejercer ante el Consejo de Universidades los derechos de información, acceso, rectificación y cancelación a los que se refiere el Título III de la citada Ley 5-1999, sin perjuicio de lo dispuesto en otra normativa que ampare los derechos como cedentes de los datos de carácter personal.			
El solicitante declara conocer los términos de la convocatoria y se compromete a cumplir los requisitos de la misma, consintiendo expresamente la notificación por medios telemáticos a los efectos de lo dispuesto en el artículo 59 de la 30/1992, de 26 de noviembre, de Régimen Jurídico de las Administraciones Públicas y del Procedimiento Administrativo Común, en su versión dada por la Ley 4/1999 de 13 de enero.			
		En: Madrid, AM 30 de diciembre de 2020	
		Firma: Representante legal de la Universidad	



1. DESCRIPCIÓN DEL TÍTULO

1.1. DATOS BÁSICOS

NIVEL	DENOMINACIÓN ESPECÍFICA	CONJUNTO	CONVENIO	CONV. ADJUNTO
Máster	Máster Universitario en Química Teórica y Modelización Computacional por la Universidad Autónoma de Madrid; la Universidad de Barcelona; la Universidad de Cantabria; la Universidad de Extremadura; la Universidad de Murcia; la Universidad de Oviedo; la Universidad de Salamanca; la Universidad de Santiago de Compostela; la Universidad de Valladolid; la Universidad de Vigo; la Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea; la Universidad Jaume I de Castellón; la Universitat de les Illes Balears y la Universitat de València (Estudi General)	Nacional		Ver Apartado 1: Anexo 1.
LISTADO DE ESPECIALIDADES				
No existen datos				
RAMA		ISCED 1	ISCED 2	
Ciencias		Química	Química	
NO HABILITA O ESTÁ VINCULADO CON PROFESIÓN REGULADA ALGUNA				
AGENCIA EVALUADORA				
Fundación para el Conocimiento Madrimasd				
UNIVERSIDAD SOLICITANTE				
Universidad Autónoma de Madrid				
LISTADO DE UNIVERSIDADES				
CÓDIGO	UNIVERSIDAD			
002	Universidad de Extremadura			
003	Universitat de les Illes Balears			
004	Universidad de Barcelona			
012	Universidad de Murcia			
014	Universidad de Salamanca			
018	Universitat de València (Estudi General)			
020	Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea			
038	Universidad de Vigo			
040	Universidad Jaume I de Castellón			
023	Universidad Autónoma de Madrid			
019	Universidad de Valladolid			
016	Universidad de Cantabria			
013	Universidad de Oviedo			
007	Universidad de Santiago de Compostela			
LISTADO DE UNIVERSIDADES EXTRANJERAS				
CÓDIGO	UNIVERSIDAD			
No existen datos				
LISTADO DE INSTITUCIONES PARTICIPANTES				
No existen datos				

1.2. DISTRIBUCIÓN DE CRÉDITOS EN EL TÍTULO



CRÉDITOS TOTALES	CRÉDITOS DE COMPLEMENTOS FORMATIVOS	CRÉDITOS EN PRÁCTICAS EXTERNAS
120	0	0
CRÉDITOS OPTATIVOS	CRÉDITOS OBLIGATORIOS	CRÉDITOS TRABAJO FIN GRADO/ MÁSTER
43	47	30
LISTADO DE ESPECIALIDADES		
ESPECIALIDAD		CRÉDITOS OPTATIVOS
No existen datos		

1.3. Universidad de Valladolid

1.3.1. CENTROS EN LOS QUE SE IMPARTE

LISTADO DE CENTROS	
CÓDIGO	CENTRO
47005668	Facultad de Ciencias

1.3.2. Facultad de Ciencias

1.3.2.1. Datos asociados al centro

TIPOS DE ENSEÑANZA QUE SE IMPARTEN EN EL CENTRO		
PRESENCIAL	SEMPRESENCIAL	A DISTANCIA
Sí	No	No
PLAZAS DE NUEVO INGRESO OFERTADAS		
PRIMER AÑO IMPLANTACIÓN	SEGUNDO AÑO IMPLANTACIÓN	
3	3	
TIEMPO COMPLETO		
	ECTS MATRÍCULA MÍNIMA	ECTS MATRÍCULA MÁXIMA
PRIMER AÑO	37.0	60.0
RESTO DE AÑOS	37.0	60.0
TIEMPO PARCIAL		
	ECTS MATRÍCULA MÍNIMA	ECTS MATRÍCULA MÁXIMA
PRIMER AÑO	24.0	36.0
RESTO DE AÑOS	24.0	36.0
NORMAS DE PERMANENCIA		
https://www.uva.es/export/sites/uva/2.docencia/2.01.grados/2.01.05.areaestudiantes/2.01.08.10.convocatoriadegracia/index.html		
LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
Sí	No	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Sí
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
No	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	

1.3. Universidad de Vigo

1.3.1. CENTROS EN LOS QUE SE IMPARTE

LISTADO DE CENTROS	
CÓDIGO	CENTRO
36020556	Facultad de Química



1.3.2. Facultad de Química

1.3.2.1. Datos asociados al centro

TIPOS DE ENSEÑANZA QUE SE IMPARTEN EN EL CENTRO		
PRESENCIAL	SEMIPRESENCIAL	A DISTANCIA
Sí	No	No
PLAZAS DE NUEVO INGRESO OFERTADAS		
PRIMER AÑO IMPLANTACIÓN	SEGUNDO AÑO IMPLANTACIÓN	
3	3	
TIEMPO COMPLETO		
	ECTS MATRÍCULA MÍNIMA	ECTS MATRÍCULA MÁXIMA
PRIMER AÑO	37.0	60.0
RESTO DE AÑOS	37.0	60.0
TIEMPO PARCIAL		
	ECTS MATRÍCULA MÍNIMA	ECTS MATRÍCULA MÁXIMA
PRIMER AÑO	24.0	36.0
RESTO DE AÑOS	24.0	36.0
NORMAS DE PERMANENCIA		
https://www.uvigo.gal/es/estudiar/gestiones-estudiantes/mientras-estudias/xestions-estudiantes-grado/permanencia-progreso		
LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
Sí	No	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Sí
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
No	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	

1.3. Universidad de Murcia

1.3.1. CENTROS EN LOS QUE SE IMPARTE

LISTADO DE CENTROS	
CÓDIGO	CENTRO
30010218	Facultad de Química

1.3.2. Facultad de Química

1.3.2.1. Datos asociados al centro

TIPOS DE ENSEÑANZA QUE SE IMPARTEN EN EL CENTRO		
PRESENCIAL	SEMIPRESENCIAL	A DISTANCIA
Sí	No	No
PLAZAS DE NUEVO INGRESO OFERTADAS		
PRIMER AÑO IMPLANTACIÓN	SEGUNDO AÑO IMPLANTACIÓN	
3	3	
TIEMPO COMPLETO		
	ECTS MATRÍCULA MÍNIMA	ECTS MATRÍCULA MÁXIMA
PRIMER AÑO	37.0	60.0
RESTO DE AÑOS	37.0	60.0
TIEMPO PARCIAL		
	ECTS MATRÍCULA MÍNIMA	ECTS MATRÍCULA MÁXIMA



PRIMER AÑO	24.0	36.0
RESTO DE AÑOS	24.0	36.0
NORMAS DE PERMANENCIA		
https://www.um.es/web/vic-estudios/contenido/normativa/permanencia		
LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
Sí	No	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Sí
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
No	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	

1.3. Universidad de Barcelona

1.3.1. CENTROS EN LOS QUE SE IMPARTE

LISTADO DE CENTROS	
CÓDIGO	CENTRO
08032971	Facultad de Química

1.3.2. Facultad de Química

1.3.2.1. Datos asociados al centro

TIPOS DE ENSEÑANZA QUE SE IMPARTEN EN EL CENTRO		
PRESENCIAL	SEMIPRESENCIAL	A DISTANCIA
Sí	No	No
PLAZAS DE NUEVO INGRESO OFERTADAS		
PRIMER AÑO IMPLANTACIÓN	SEGUNDO AÑO IMPLANTACIÓN	
9	9	
TIEMPO COMPLETO		
	ECTS MATRÍCULA MÍNIMA	ECTS MATRÍCULA MÁXIMA
PRIMER AÑO	37.0	60.0
RESTO DE AÑOS	37.0	60.0
TIEMPO PARCIAL		
	ECTS MATRÍCULA MÍNIMA	ECTS MATRÍCULA MÁXIMA
PRIMER AÑO	24.0	36.0
RESTO DE AÑOS	24.0	36.0
NORMAS DE PERMANENCIA		
http://www.ub.edu/acad/noracad/permanencia.pdf		
LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
Sí	No	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Sí
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
No	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	



1.3. Universidad de Cantabria

1.3.1. CENTROS EN LOS QUE SE IMPARTE

LISTADO DE CENTROS	
CÓDIGO	CENTRO
39011359	Facultad de Ciencias

1.3.2. Facultad de Ciencias

1.3.2.1. Datos asociados al centro

TIPOS DE ENSEÑANZA QUE SE IMPARTEN EN EL CENTRO		
PRESENCIAL	SEMIPRESENCIAL	A DISTANCIA
Sí	No	No
PLAZAS DE NUEVO INGRESO OFERTADAS		
PRIMER AÑO IMPLANTACIÓN	SEGUNDO AÑO IMPLANTACIÓN	
3	3	
	TIEMPO COMPLETO	
	ECTS MATRÍCULA MÍNIMA	ECTS MATRÍCULA MÁXIMA
PRIMER AÑO	37.0	60.0
RESTO DE AÑOS	37.0	60.0
	TIEMPO PARCIAL	
	ECTS MATRÍCULA MÍNIMA	ECTS MATRÍCULA MÁXIMA
PRIMER AÑO	24.0	36.0
RESTO DE AÑOS	24.0	36.0
NORMAS DE PERMANENCIA		
https://web.unican.es/estudios/normativa-academica/normativa-de-estudios-de-primer-y-segundo-ciclo/regimen-de-permanencia		
LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
Sí	No	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Sí
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
No	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	

1.3. Universidad de Oviedo

1.3.1. CENTROS EN LOS QUE SE IMPARTE

LISTADO DE CENTROS	
CÓDIGO	CENTRO
33024502	Centro Internacional de Postgrado

1.3.2. Centro Internacional de Postgrado

1.3.2.1. Datos asociados al centro

TIPOS DE ENSEÑANZA QUE SE IMPARTEN EN EL CENTRO		
PRESENCIAL	SEMIPRESENCIAL	A DISTANCIA
Sí	No	No
PLAZAS DE NUEVO INGRESO OFERTADAS		
PRIMER AÑO IMPLANTACIÓN	SEGUNDO AÑO IMPLANTACIÓN	
3	3	
	TIEMPO COMPLETO	



	ECTS MATRÍCULA MÍNIMA	ECTS MATRÍCULA MÁXIMA
PRIMER AÑO	37.0	60.0
RESTO DE AÑOS	37.0	60.0
TIEMPO PARCIAL		
	ECTS MATRÍCULA MÍNIMA	ECTS MATRÍCULA MÁXIMA
PRIMER AÑO	24.0	36.0
RESTO DE AÑOS	24.0	36.0
NORMAS DE PERMANENCIA		
https://www.uniovi.es/-/progreso_permanencia_continuar-estudios-de-grado-o-master-sin-cumplir-normas-de-permanencia-o-progreso		
LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
Sí	No	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Sí
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
No	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	

1.3. Universidad Autónoma de Madrid

1.3.1. CENTROS EN LOS QUE SE IMPARTE

LISTADO DE CENTROS	
CÓDIGO	CENTRO
28027060	Facultad de Ciencias

1.3.2. Facultad de Ciencias

1.3.2.1. Datos asociados al centro

TIPOS DE ENSEÑANZA QUE SE IMPARTEN EN EL CENTRO		
PRESENCIAL	SEMPRESENCIAL	A DISTANCIA
Sí	No	No
PLAZAS DE NUEVO INGRESO OFERTADAS		
PRIMER AÑO IMPLANTACIÓN	SEGUNDO AÑO IMPLANTACIÓN	
9	9	
TIEMPO COMPLETO		
	ECTS MATRÍCULA MÍNIMA	ECTS MATRÍCULA MÁXIMA
PRIMER AÑO	37.0	60.0
RESTO DE AÑOS	37.0	60.0
TIEMPO PARCIAL		
	ECTS MATRÍCULA MÍNIMA	ECTS MATRÍCULA MÁXIMA
PRIMER AÑO	24.0	36.0
RESTO DE AÑOS	24.0	36.0
NORMAS DE PERMANENCIA		
https://www.uam.es/UAM/Permanencia/1242665181069.htm?language=es		
LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
Sí	No	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS



No	No	Sí
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
No	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	

1.3. Universidad de Extremadura

1.3.1. CENTROS EN LOS QUE SE IMPARTE

LISTADO DE CENTROS	
CÓDIGO	CENTRO
06005329	Facultad de Ciencias

1.3.2. Facultad de Ciencias

1.3.2.1. Datos asociados al centro

TIPOS DE ENSEÑANZA QUE SE IMPARTEN EN EL CENTRO		
PRESENCIAL	SEMIPRESENCIAL	A DISTANCIA
Sí	No	No
PLAZAS DE NUEVO INGRESO OFERTADAS		
PRIMER AÑO IMPLANTACIÓN	SEGUNDO AÑO IMPLANTACIÓN	
3	3	
TIEMPO COMPLETO		
	ECTS MATRÍCULA MÍNIMA	ECTS MATRÍCULA MÁXIMA
PRIMER AÑO	37.0	60.0
RESTO DE AÑOS	37.0	60.0
TIEMPO PARCIAL		
	ECTS MATRÍCULA MÍNIMA	ECTS MATRÍCULA MÁXIMA
PRIMER AÑO	24.0	36.0
RESTO DE AÑOS	24.0	36.0
NORMAS DE PERMANENCIA		
https://www.unex.es/conoce-la-uex/centros/derecho/archivos/ficheros/Noticias_eventos/normativa%20reguladora%20del%20progreso%20y%20la%20permanencia%20de%20estudiantes%20en%20la%20Universidad%20de%20Extremadura.pdf/view		
LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
Sí	No	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Sí
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
No	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	

1.3. Universidad Jaume I de Castellón

1.3.1. CENTROS EN LOS QUE SE IMPARTE

LISTADO DE CENTROS	
CÓDIGO	CENTRO
12004990	Escuela Superior de Tecnología y Ciencias Experimentales

1.3.2. Escuela Superior de Tecnología y Ciencias Experimentales

1.3.2.1. Datos asociados al centro

TIPOS DE ENSEÑANZA QUE SE IMPARTEN EN EL CENTRO



PRESENCIAL	SEMIPRESENCIAL	A DISTANCIA
Sí	No	No
PLAZAS DE NUEVO INGRESO OFERTADAS		
PRIMER AÑO IMPLANTACIÓN		SEGUNDO AÑO IMPLANTACIÓN
3		3
TIEMPO COMPLETO		
ECTS MATRÍCULA MÍNIMA		ECTS MATRÍCULA MÁXIMA
PRIMER AÑO	37.0	60.0
RESTO DE AÑOS	37.0	60.0
TIEMPO PARCIAL		
ECTS MATRÍCULA MÍNIMA		ECTS MATRÍCULA MÁXIMA
PRIMER AÑO	24.0	36.0
RESTO DE AÑOS	24.0	36.0
NORMAS DE PERMANENCIA		
https://documents.uji.es/alfresco/d/d/workspace/SpacesStore/b4f31a11-ba56-464d-b339-f7720fffd260/Normativa+Permanencia.pdf?guest=true#:~:text=El%20estudiantado%20que%20durante%20dos,un%20estudio%20de%20m%C3%A1ster%20diferente.		
LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
Sí	No	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Sí
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
No	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	

1.3. Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea

1.3.1. CENTROS EN LOS QUE SE IMPARTE

LISTADO DE CENTROS	
CÓDIGO	CENTRO
20006274	Facultad de Química
48012838	Escuela de Doctorado de la UPV/EHU

1.3.2. Facultad de Química

1.3.2.1. Datos asociados al centro

TIPOS DE ENSEÑANZA QUE SE IMPARTEN EN EL CENTRO		
PRESENCIAL	SEMIPRESENCIAL	A DISTANCIA
Sí	No	No
PLAZAS DE NUEVO INGRESO OFERTADAS		
PRIMER AÑO IMPLANTACIÓN		SEGUNDO AÑO IMPLANTACIÓN
3		3
TIEMPO COMPLETO		
ECTS MATRÍCULA MÍNIMA		ECTS MATRÍCULA MÁXIMA
PRIMER AÑO	37.0	60.0
RESTO DE AÑOS	37.0	60.0
TIEMPO PARCIAL		
ECTS MATRÍCULA MÍNIMA		ECTS MATRÍCULA MÁXIMA



PRIMER AÑO	24.0	36.0
RESTO DE AÑOS	24.0	36.0
NORMAS DE PERMANENCIA		
https://www.ehu.eus/es/web/estudiosdeposgrado-graduondokoikasketak/jarraitzeko-arauak		
LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
Sí	No	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Sí
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
No	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	

1.3.2. Escuela de Doctorado de la UPV/EHU

1.3.2.1. Datos asociados al centro

TIPOS DE ENSEÑANZA QUE SE IMPARTEN EN EL CENTRO		
PRESENCIAL	SEMIPRESENCIAL	A DISTANCIA
Sí	No	No
PLAZAS DE NUEVO INGRESO OFERTADAS		
PRIMER AÑO IMPLANTACIÓN	SEGUNDO AÑO IMPLANTACIÓN	
3	3	
TIEMPO COMPLETO		
	ECTS MATRÍCULA MÍNIMA	ECTS MATRÍCULA MÁXIMA
PRIMER AÑO	37.0	60.0
RESTO DE AÑOS	37.0	60.0
TIEMPO PARCIAL		
	ECTS MATRÍCULA MÍNIMA	ECTS MATRÍCULA MÁXIMA
PRIMER AÑO	24.0	36.0
RESTO DE AÑOS	24.0	36.0
NORMAS DE PERMANENCIA		
https://www.ehu.eus/es/web/estudiosdeposgrado-graduondokoikasketak/jarraitzeko-arauak		
LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
Sí	No	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Sí
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
No	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	

1.3. Universidad de Santiago de Compostela

1.3.1. CENTROS EN LOS QUE SE IMPARTE

LISTADO DE CENTROS	
CÓDIGO	CENTRO
15020271	Facultad de Química



1.3.2. Facultad de Química

1.3.2.1. Datos asociados al centro

TIPOS DE ENSEÑANZA QUE SE IMPARTEN EN EL CENTRO		
PRESENCIAL	SEMIPRESENCIAL	A DISTANCIA
Sí	No	No
PLAZAS DE NUEVO INGRESO OFERTADAS		
PRIMER AÑO IMPLANTACIÓN	SEGUNDO AÑO IMPLANTACIÓN	
3	3	
	TIEMPO COMPLETO	
	ECTS MATRÍCULA MÍNIMA	ECTS MATRÍCULA MÁXIMA
PRIMER AÑO	37.0	60.0
RESTO DE AÑOS	37.0	60.0
	TIEMPO PARCIAL	
	ECTS MATRÍCULA MÍNIMA	ECTS MATRÍCULA MÁXIMA
PRIMER AÑO	24.0	36.0
RESTO DE AÑOS	24.0	36.0
NORMAS DE PERMANENCIA		
https://www.usc.gal/es/servizos/oiu/Permanencia.html		
LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
Sí	No	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Sí
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
No	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	

1.3. Universitat de les Illes Balears

1.3.1. CENTROS EN LOS QUE SE IMPARTE

LISTADO DE CENTROS	
CÓDIGO	CENTRO
07008971	Centro de Estudios de Postgrado

1.3.2. Centro de Estudios de Postgrado

1.3.2.1. Datos asociados al centro

TIPOS DE ENSEÑANZA QUE SE IMPARTEN EN EL CENTRO		
PRESENCIAL	SEMIPRESENCIAL	A DISTANCIA
Sí	No	No
PLAZAS DE NUEVO INGRESO OFERTADAS		
PRIMER AÑO IMPLANTACIÓN	SEGUNDO AÑO IMPLANTACIÓN	
3	3	
	TIEMPO COMPLETO	
	ECTS MATRÍCULA MÍNIMA	ECTS MATRÍCULA MÁXIMA
PRIMER AÑO	37.0	60.0
RESTO DE AÑOS	37.0	60.0
	TIEMPO PARCIAL	
	ECTS MATRÍCULA MÍNIMA	ECTS MATRÍCULA MÁXIMA



PRIMER AÑO	24.0	36.0
RESTO DE AÑOS	24.0	36.0
NORMAS DE PERMANENCIA		
https://estudis.uib.es/es/estudis-de-master/Estudiar-a-la-UIB/Normativa/		
LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
Sí	No	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Sí
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
No	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	

1.3. Universidad de Salamanca

1.3.1. CENTROS EN LOS QUE SE IMPARTE

LISTADO DE CENTROS	
CÓDIGO	CENTRO
37008618	Facultad de Ciencias Químicas

1.3.2. Facultad de Ciencias Químicas

1.3.2.1. Datos asociados al centro

TIPOS DE ENSEÑANZA QUE SE IMPARTEN EN EL CENTRO		
PRESENCIAL	SEMIPRESENCIAL	A DISTANCIA
Sí	No	No
PLAZAS DE NUEVO INGRESO OFERTADAS		
PRIMER AÑO IMPLANTACIÓN	SEGUNDO AÑO IMPLANTACIÓN	
3	3	
TIEMPO COMPLETO		
	ECTS MATRÍCULA MÍNIMA	ECTS MATRÍCULA MÁXIMA
PRIMER AÑO	37.0	60.0
RESTO DE AÑOS	37.0	60.0
TIEMPO PARCIAL		
	ECTS MATRÍCULA MÍNIMA	ECTS MATRÍCULA MÁXIMA
PRIMER AÑO	24.0	36.0
RESTO DE AÑOS	24.0	36.0
NORMAS DE PERMANENCIA		
https://www.usal.es/files/normas_permanencia_estudiantes_usal.pdf		
LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
Sí	No	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Sí
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
No	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	



1.3. Universitat de València (Estudi General)

1.3.1. CENTROS EN LOS QUE SE IMPARTE

LISTADO DE CENTROS	
CÓDIGO	CENTRO
46035291	Instituto Universitario de Ciencia Molecular

1.3.2. Instituto Universitario de Ciencia Molecular

1.3.2.1. Datos asociados al centro

TIPOS DE ENSEÑANZA QUE SE IMPARTEN EN EL CENTRO		
PRESENCIAL	SEMIPRESENCIAL	A DISTANCIA
Sí	No	No
PLAZAS DE NUEVO INGRESO OFERTADAS		
PRIMER AÑO IMPLANTACIÓN	SEGUNDO AÑO IMPLANTACIÓN	
9	9	
TIEMPO COMPLETO		
	ECTS MATRÍCULA MÍNIMA	ECTS MATRÍCULA MÁXIMA
PRIMER AÑO	37.0	60.0
RESTO DE AÑOS	37.0	60.0
TIEMPO PARCIAL		
	ECTS MATRÍCULA MÍNIMA	ECTS MATRÍCULA MÁXIMA
PRIMER AÑO	24.0	36.0
RESTO DE AÑOS	24.0	36.0
NORMAS DE PERMANENCIA		
https://www.uv.es/uvweb/universidad/es/estudios-grado/informacion-academica-administrativa/convocatorias-calificaciones/permanencia-1285846101449.html		
LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
Sí	No	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Sí
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
No	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	



2. JUSTIFICACIÓN, ADECUACIÓN DE LA PROPUESTA Y PROCEDIMIENTOS

Ver Apartado 2: Anexo 1.

3. COMPETENCIAS

3.1 COMPETENCIAS BÁSICAS Y GENERALES
BÁSICAS
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.
GENERALES
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.
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.
3.2 COMPETENCIAS 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.
CT05 - Capacidad de razonamiento y reflexión crítica y autocrítica como vía para mejorar el propio proceso de aprendizaje y la generación y desarrollo de ideas en un contexto profesional o de investigación.
CT06 - Compromiso social y ético con colectivos en situación de riesgo o exclusión asumiendo responsabilidades vinculadas a la complejidad de la intervención profesional.
CT07 - Saber comunicar y argumentar conocimientos, resultados y conclusiones de la investigación o práctica profesional a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades
CT08 - Decidir y utilizar los procedimientos adecuados para conseguir financiación como investigador/a o como emprendedor/a
CT09 - Capacidad de obtener, seleccionar, elaborar y procesar información proveniente de fuentes diversas con criterios objetivos, priorizándolas según su calidad y pertinencia
CT10 - Predecir y controlar la evolución de situaciones complejas mediante el desarrollo de nuevas e innovadoras metodologías de trabajo adaptadas al ámbito científico/investigador y profesional
CT11 - Identificar y seleccionar con rigor la metodología adecuada para formular hipótesis, definir problemas y diseñar estrategias de trabajo propias de la investigación incidiendo en el compromiso ético
CT12 - Fomentar en contextos académicos y profesionales el avance del conocimiento científico-tecnológico, social o cultural y su transferencia a la sociedad
CT13 - Capacidad de asumir la responsabilidad del propio desarrollo profesional, de acuerdo a los retos y oportunidades que plantea la sociedad



CT14 - Capacidad para producir contenidos digitales para la sociedad, fomentando la práctica de las nuevas tecnologías desde el compromiso con la seguridad y la ética profesional
3.3 COMPETENCIAS 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 - Amplia 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.
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 cuánticas 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.
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.

4. ACCESO Y ADMISIÓN DE ESTUDIANTES

4.1 SISTEMAS DE INFORMACIÓN PREVIO

Ver Apartado 4: Anexo 1.

4.2 REQUISITOS DE ACCESO Y CRITERIOS DE ADMISIÓN

NORMATIVA DE ENSEÑANZAS OFICIALES DE POSGRADO DE LA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE MADRID (Aprobada en Consejo de Gobierno de 10 de Julio de 2008)

Enseñanzas oficiales de Máster

Condiciones de acceso:



Para acceder a las enseñanzas oficiales de máster será necesario estar en posesión de un título universitario oficial español. Asimismo, podrán acceder los titulados universitarios conforme a sistemas educativos extranjeros sin necesidad de la homologación de sus títulos, siempre que acrediten un nivel de formación equivalente a los correspondientes títulos universitarios oficiales españoles y que faculten, en el país expedidor del título, para el acceso a enseñanzas de posgrado.

4.2.1. Requisitos de acceso

Los requisitos de acceso serán los mismos en todas las Instituciones firmantes del convenio. Para acceder a las enseñanzas oficiales del *Máster Universitario en Química Teórica y Modelización Computacional* será necesario:

1. Estar en posesión de un título universitario oficial español en Química, Física o Ciencia de los Materiales u otro expedido por una institución de educación superior perteneciente a otro Estado integrante del Espacio Europeo de Educación Superior que faculte en el mismo para el acceso a enseñanzas de máster.
2. Así mismo, podrán acceder los titulados conforme a sistemas educativos ajenos al Espacio Europeo de Educación Superior sin necesidad de la homologación de sus títulos, previa comprobación por las Universidades firmantes del convenio de que aquellos acreditan un nivel de formación equivalente a los correspondientes títulos universitarios oficiales españoles ya mencionados y que facultan en el país expedidor del título para el acceso a enseñanzas de postgrado. El acceso por esta vía no implicará, en ningún caso, la homologación del título previo de que este en posesión el interesado, ni su reconocimiento a otros efectos que el de cursar las enseñanzas de Máster.

4.2.2 órgano de admisión

La **Comisión Internacional de Coordinación Académica del Máster** será el órgano responsable del proceso de admisión y estará compuesta por los coordinadores de todas las universidades que forman parte del consorcio.

4.2.3. Criterios de admisión

Los criterios de admisión serán los mismos en todas las Instituciones firmantes del convenio.

La admisión de los estudiantes tendrá en cuenta los siguientes criterios y ponderaciones:

Criterio	Ponderación	(%)
Expediente académico		50
Carta de motivación		15
Referencia de dos personas		15
Certificado acreditativo de conocimiento de Inglés y de español para candidatos de terceros países.		20

La Comisión Internacional de Coordinación Académica del máster garantiza la objetividad e imparcialidad a la hora de evaluar a las personas candidatas al programa y valorará a la hora de ponderar:

1. Que se cumplan los requisitos de acceso en cuanto a la titulación, además valorarán las notas en el ámbito de química física. Podrán ser admitidos otros títulos de grado diferentes a Química, Física o Ciencia de los Materiales, siempre que se acredite conocimientos al nivel del "Chemistry eurobachelor" (o equivalentes) de los temas siguientes: Enlace Químico, estructura atómica y molecular e interacciones moleculares, Física general, Química Física general, Termodinámica, Cinética y Espectroscopía. Algunas deficiencias pueden ser compensadas mediante Complementos Formativos. Sin embargo, solicitudes con deficiencias en más de dos de las áreas mencionadas, no podrán ser aceptadas.
2. Que la persona candidata posea un certificado reconocido internacionalmente de suficiencia en inglés equivalente a TOEFL con calificación mínima de 213/500, o un IELTS con calificación mínima de 6. De acuerdo con los descriptores del marco común europeo de referencia para las lenguas, equivaldría a un nivel mínimo B2 o C1.

Por lo que respecta a los sistemas y procedimientos de admisión adaptados a estudiantes con necesidades educativas especiales derivadas de su condición de discapacidad, las Universidades cuentan con servicios que prestan apoyo al mencionado colectivo de estudiantes, garantizando la igualdad de oportunidades y el derecho a la educación.

4.3 Apoyo a estudiantes

Información previa a la matrícula y acogida

Toda persona interesada en el Máster Universitario en Química Teórica y Modelización Computacional podrá acceder a la información sobre el título y sobre los procesos de acceso y matriculación a través de diferentes vías:

A través de las páginas web institucionales de las universidades implicadas en el convenio. El máster cuenta con una página propia en la que se incluye toda la información detallada del mismo.

Se está llevando una política activa de promoción del máster a través de distintas páginas web. Actualmente se están utilizando:

-Madrid I+D

-Molecular Dynamics News

-Euraxess

-Universia

El Coordinador del máster se ocupará personalmente de solventar todas aquellas dudas que el potencial alumnado le plantee, facilitándoles las direcciones pertinentes de los diferentes servicios de las Universidades a los que pueden dirigirse. En caso de que la persona interesada lo requiera tendrán una reunión previa a la matriculación para explicar de forma detallada las características del máster.



Cada Universidad cuenta con Unidades encargadas de dar información y asesoramiento sobre la oferta formativa de postgrado tales como el OPAL (Observatorio de Inserción Profesional y Asesoramiento Laboral de la Universidad de Valencia, los servicios de intermediación de trabajo y de prácticas en empresas de la Universidad de Barcelona o la oficina de prácticas externas y orientación para el empleo de la Universidad Autónoma de Madrid.

Acogida de Estudiantes

Los estudiantes inscritos en el programa serán recibidos en su primer día por el Coordinador del máster en su Universidad. El Coordinador lo presentará al resto de personal, le explicará los procedimientos propios de la Universidad y los pondrá en contacto con la oficina de gestión del máster para requerimientos posteriores relacionados con el mismo.

4.3 APOYO A ESTUDIANTES

Una vez matriculados, la normativa de gestión de Másteres Universitarios (oficiales) establece que los estudiantes contarán con un tutor o tutora personal que les asignará la **Comisión de Coordinación Académica del Máster** tras su matrícula, además del director de trabajo fin de máster, que cada estudiante escoge basándose en la oferta anual de trabajos realizada por el profesorado. Ambos actuarán como orientadores en la toma de las decisiones necesarias para el buen desarrollo académico de sus estudios de postgrado.

La información acerca de los aspectos referidos al funcionamiento interno del Máster (horarios, calendario, actividades, etc) se recogen con detalle en la página web del Máster: <http://www.emtccm.org/>

Así mismo, el responsable y los profesores o profesoras que forman la Comisión de Coordinación Académica del Máster están siempre accesibles a las necesidades del alumnado del Máster, así como todo el profesorado implicado, que dispone de un tiempo de tutoría.

A nivel institucional, las Universidades firmantes del convenio cuentan con servicios de apoyo y orientación del alumnado. Por ejemplo, la Universidad coordinadora (UAM) cuenta con:

Oficina de orientación y atención al estudiante (http://www.uam.es/ss/Satellite/es/1234886352057/1234886859779/servicio/servicio/Oficina_de_orientacion_y_atencion_al_estudiante.htm): La OAE es un servicio de atención a los estudiantes que ofrece, de forma gratuita, orientación y asesoramiento en diferentes campos y materias relacionadas con la Universidad.

Oficina de Acogida para estudiantes, investigadores y profesores extranjeros. (http://www.uam.es/ss/Satellite/es/1242652245583/1234886376451/servicio/servicio/Oficina_de_Acogida.htm): Este organismo brinda una atención integral a los estudiantes, investigadores y profesores internacionales, atendiendo a sus necesidades de información u orientación académica y administrativa, favoreciendo el Desarrollo Académico y Profesional del gremio.

4.4 SISTEMA DE TRANSFERENCIA Y RECONOCIMIENTO DE CRÉDITOS

Reconocimiento de Créditos Cursados en Enseñanzas Superiores Oficiales no Universitarias

MÍNIMO	MÁXIMO
0	0

Reconocimiento de Créditos Cursados en Títulos Propios

MÍNIMO	MÁXIMO
0	18

Adjuntar Título Propio

Ver Apartado 4: Anexo 2.

Reconocimiento de Créditos Cursados por Acreditación de Experiencia Laboral y Profesional

MÍNIMO	MÁXIMO
0	18

La normativa sobre adaptación reconocimiento y transferencia de créditos de la UAM, aprobado en Consejo de Gobierno el 8 de febrero de 2009 y modificada el 8 de octubre de 2010 se encuentra en el siguiente vínculo y se expone a continuación:

UAM - Centro Estudios Posgrado - Normativa de Másteres Oficiales UAM

NORMATIVA SOBRE ADAPTACIÓN, RECONOCIMIENTO Y TRANSFERENCIA DE CRÉDITOS EN LA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE MADRID

Aprobada en el Consejo de Gobierno del día 8 de febrero de 2008.

Modificada en Consejo de Gobierno del 8 de octubre de 2010.



PREÁMBULO

El Real Decreto 1393/2007, de 29 de octubre, por el que se establece la ordenación de las enseñanzas universitarias oficiales y el Real Decreto 861/2010, de 2 de julio, por el que se modifica el anterior, potencian la movilidad entre las distintas universidades españolas y dentro de una misma universidad. Al tiempo, el proceso de transformación de las titulaciones previas al Espacio Europeo de Educación Superior en otras conforme a las previsiones del Real Decreto citado crea situaciones de adaptación que conviene prever. Por todo ello, resulta imprescindible un sistema de adaptación, reconocimiento y transferencia de créditos, en el que los créditos cursados en otra universidad puedan ser reconocidos e incorporados al expediente académico del estudiante.

En este contexto la Universidad Autónoma de Madrid tiene como objetivo, por un lado, fomentar la movilidad de sus estudiantes para permitir su enriquecimiento y desarrollo personal y académico, y por otro, facilitar el procedimiento para aquellos estudiantes que deseen reciclar sus estudios universitarios cambiando de centro y/o titulación.

Inspirado en estas premisas la Universidad Autónoma de Madrid dispone el siguiente sistema de adaptación, reconocimiento y transferencia de créditos aplicable a sus estudiantes.

Artículo 1. *ÁMBITO DE APLICACIÓN*

El ámbito de aplicación de estas normas son las enseñanzas universitarias oficiales de grado y posgrado, según señalan las disposiciones establecidas en el Real Decreto 1393/2007, de 29 de octubre, por el que se establece la ordenación de las enseñanzas universitarias oficiales.

Artículo 2. *DEFINICIONES*

1. Adaptación de créditos

La adaptación de créditos implica la aceptación por la Universidad Autónoma de Madrid de los créditos correspondientes a estudios previos al Real Decreto 1393/2007, realizados en esta Universidad o en otras distintas.

2. Reconocimiento de créditos

El reconocimiento de créditos ECTS implica la aceptación por la Universidad Autónoma de Madrid de los créditos ECTS que, habiendo sido obtenidos en unas enseñanzas oficiales, en la misma u otra universidad, son computados en otras enseñanzas distintas a efectos de la obtención de un título oficial.

También podrán ser objeto de reconocimiento los créditos superados en enseñanzas superiores oficiales y en enseñanzas universitarias no oficiales. Asimismo, podrán reconocerse créditos por experiencia laboral o profesional acreditada, siempre que dicha experiencia esté relacionada con las competencias inherentes al título que se pretende obtener. En ambos casos deberán tenerse en cuenta las limitaciones que se establecen en los artículos 4 y 6.

3. Transferencia de créditos

La transferencia de créditos ECTS implica que, en los documentos académicos oficiales acreditativos de las enseñanzas seguidas por cada estudiante, la Universidad Autónoma de Madrid incluirá la totalidad de los créditos obtenidos en enseñanzas oficiales cursadas con anterioridad, en la misma u otra universidad, que no hayan conducido a la obtención de un título oficial.

Artículo 3. *REGLAS SOBRE ADAPTACIÓN DE CRÉDITOS*

1. En el supuesto de estudios previos realizados en la Universidad Autónoma de Madrid, en una titulación equivalente, la adaptación de créditos se ajustará a una tabla de equivalencias que realizará la Comisión Académica (u órgano equivalente), conforme a lo que se prevea al amparo del punto 10.2 del Anexo I del Real Decreto 1393/2007.

2. En el caso de estudios previos realizados en otras universidades o sin equivalencia en las nuevas titulaciones de la Universidad Autónoma de Madrid, la adaptación de créditos se realizará, a petición del estudiante, por parte de la



Comisión Académica (u órgano equivalente) atendiendo en lo posible a los conocimientos asociados a las materias cursadas y su valor en créditos.

Artículo 4. *REGLAS SOBRE RECONOCIMIENTO DE CRÉDITOS*

1. Se reconocerán automáticamente:

a) Los créditos correspondientes a materias de formación básica siempre que la titulación de destino de esta Universidad pertenezca a la misma rama de conocimiento que la de origen.

b) Los créditos correspondientes a aquellas otras materias de formación básica cursadas pertenecientes a la rama de conocimiento de la titulación de destino.

En los supuestos a) y b) anteriores, la Comisión Académica (u órgano equivalente) decidirá, a solicitud del estudiante, a qué materias de ésta se imputan los créditos de formación básica de la rama de conocimiento superados en la titulación de origen, teniendo en cuenta la adecuación entre competencias y los conocimientos asociados a dichas materias.

Sólo en el caso de que se haya superado un número de créditos menor asociado a una materia de formación básica de origen se establecerá, por el órgano responsable, la necesidad o no de concluir los créditos determinados en la materia de destino por aquellos complementos formativos que se diseñen.

c) Los créditos de los módulos o materias definidos por el Gobierno en las normativas correspondientes a los estudios de máster oficial que habiliten para el ejercicio de profesiones reguladas.

2. El resto de los créditos no pertenecientes a materias de formación básica podrán ser reconocidos por la Comisión Académica (u órgano equivalente) teniendo en cuenta la adecuación entre las competencias, los conocimientos y el número de créditos asociados a las materias cursadas por el estudiante y los previstos en el plan de estudios, o bien valorando su carácter transversal.

3. No podrán ser objeto de reconocimiento los créditos correspondientes a los trabajos de fin de grado y máster.

4. El número de créditos que sean objeto de reconocimiento a partir de experiencia profesional o laboral y de enseñanzas universitarias no oficiales no podrá ser superior, en su conjunto, al 15 por ciento del total de los créditos que constituyen el plan de estudios.

No obstante lo anterior, los créditos procedentes de títulos no oficiales podrán, excepcionalmente, ser objeto de reconocimiento en un porcentaje superior siempre que el correspondiente título propio haya sido extinguido y sustituido por un título oficial. A tal efecto, en la memoria de verificación deberá constar dicha circunstancia conforme a los criterios especificados en el R.D. 861/2010.

5. Se articularán Comisiones Académicas, por Centros, en orden a valorar la equivalencia entre las materias previamente cursadas y las materias de destino para las que se solicite reconocimiento.

6. Al objeto de facilitar el trabajo de reconocimiento automático en las Administraciones/Secretarías de los Centros, las Comisiones adoptarán y mantendrán actualizadas tablas de reconocimiento para las materias previamente cursadas en determinadas titulaciones y universidades que más frecuentemente lo solicitan.

7. Los estudiantes podrán solicitar reconocimiento de créditos por participación en actividades universitarias culturales, deportivas, de representación estudiantil, solidarias y de cooperación, hasta el valor máximo establecido en el plan de estudios, de acuerdo con la normativa que sobre actividades de tipo extracurricular se desarrolle.

Artículo 5. *REGLAS SOBRE TRANSFERENCIA DE CRÉDITOS*



Se incluirán en el expediente académico del estudiante los créditos correspondientes a materias superadas en otros estudios universitarios oficiales no terminados.

Artículo 6. CALIFICACIONES

1. Al objeto de facilitar la movilidad del estudiante se arrastrará la calificación obtenida en los reconocimientos y transferencias de créditos ECTS y en las adaptaciones de créditos previstas en el artículo 3. En su caso, se realizará media ponderada cuando coexistan varias materias de origen y una sola de destino.

2. El reconocimiento de créditos a partir de experiencia profesional o laboral y de enseñanzas universitarias no oficiales no incorporará la calificación de los mismos.

3. En todos los supuestos en los que no haya calificación se hará constar APTO, y no baremará a efectos de media de expediente.

Artículo 7. ÓRGANOS COMPETENTES

El órgano al que compete la adaptación, el reconocimiento y la transferencia de créditos es la Comisión Académica (u órgano equivalente que regula la ordenación académica de cada titulación oficial), según quede establecido en el Reglamento del Centro y en los Estatutos de la Universidad Autónoma de Madrid.

Artículo 8. PROCEDIMIENTO

1. Las reglas que regirán el procedimiento de tramitación de las solicitudes de adaptación, transferencia y reconocimiento de créditos, necesariamente, dispondrán de:

a) Un modelo unificado de solicitud de la Universidad Autónoma de Madrid.

b) Un plazo de solicitud.

c) Un plazo de resolución de las solicitudes.

2. Contra los acuerdos que se adopten podrán interponerse los recursos previstos en los Estatutos de la Universidad Autónoma de Madrid.

DISPOSICIÓN ADICIONAL

Los estudiantes que, por programas o convenios internacionales o nacionales, estén bajo el ámbito de movilidad se regirán, aparte de lo establecido en esta normativa, por lo regulado en su propia normativa y con arreglo a los acuerdos de estudios suscritos previamente por los estudiantes y los centros de origen y destino de los mismos.

Estudiantes UAM:

Universidad Autónoma de Madrid - Normativa reguladora de la movilidad de estudiantes en la Universidad Autónoma de Madrid: [estudiantes entrantes \(uam.es\)](https://uam.es)

Estudiantes de otras universidades:

Universidad Autónoma de Madrid - [Estudiantes de intercambio internacionales \(uam.es\)](https://uam.es)

4.6 COMPLEMENTOS FORMATIVOS

Los Complementos Formativos denominados "Nivelación en Química", "Nivelación en Física" y "Nivelación en Matemáticas", han sido diseñado para aquellos estudiantes provenientes de grados afines al de Química, que requieran mejorar su base en matemáticas, física o química. De tal forma que se garantice un nivel homogéneo entre los estu-



diantes que siguen el Máster. Para tales propósitos, la **Comisión de Coordinación Académica del Máster**, previa evaluación del expediente académico, permite que el estudiante ingrese al máster bajo la realización o no de Complementos Formativos configurados fuera del Máster.

Aunque la **Comisión de Coordinación Académica del Máster** seleccionará la/s asignatura/s que el estudiante debe seguir como complemento formativo dentro de un paquete de asignaturas que posee cada Universidad en sus diferentes Grados, se citará a modo de ejemplo las siguientes tres asignaturas impartidas en la Universidad Autónoma de Madrid: "Química Física II" (del tercer curso del Grado en Química para "Nivelación en Química"); "Física" (del primer curso del Grado en Química para "Nivelación en Física") y "Álgebra Lineal" (del primer curso del Grado en Matemáticas). Los contenidos reportados en sus correspondientes fichas muestran el nivel que la persona candidata al máster debe poseer. Estos complementos se impartirán en castellano.

Complemento Formativo: Nivelación en Química. Carácter: Optativa/Obligatoria		
Ubicación Temporal y Duración:		M1, anual.
Competencias que el estudiante adquiere:		CB6, CB10, CG02, CG03, CE02.
Contenidos:		1.- FUNDAMENTOS DE QUÍMICA CUÁNTICA Antecedentes de la Mecánica Cuántica Introducción a la Mecánica Cuántica. Átomos Moléculas y Enlace Químico Interacción Radiación-Materia 2. ESPECTROSCOPIA MOLECULAR Moléculas Diatómicas Moléculas Poliatómicas Espectroscopías de Resonancia Magnética. 3. TERMODINÁMICA ESTADÍSTICA Termodinámica Estadística Funciones de Partición. 4. MACROMOLECULAS PROGRAMA DE PRÁCTICAS. 1.- Resolución de sistemas modelo: Pozos de potencial, barreras y efecto túnel. 2.- Espectros atómicos. 3.- Curvas de energía potencial para moléculas diatómicas. 4.- Cálculo de superficies de energía potencial. 5.- Teoría de orbitales moleculares en moléculas poliatómicas. 6.- Espectros UV de moléculas conjugadas. 7.- Fotofísica. 8.- Espectroscopia de infrarrojo y Raman. 9.- Simulación de Espectros NMR y ESR. 10.- Determinación de pesos moleculares de polímeros.
Actividades Formativas:		
ACTIVIDAD	HORAS/CARACTER	COMPETENCIAS
A01	22 horas presenciales	CB6, CG02, CE02
A10	10 horas presenciales	CB6, CG02, CG03, CE02.
A05	14 horas presenciales	CB6, , CG02, CG03, CE02
A04	4 horas presenciales	CB6, CG02, CE02
A09	4 horas no presenciales	CB6, CB10, CG02, CG03, CE02
A02	56 horas no presenciales	CB6, CB10, CG02, CG03, CE02
A06	15 horas no presenciales	CB6, CB10, CG02, CE02.
Metodología Docente:		M01, M03, M06, M10.
Lengua en la que se imparte:		Castellano.
Sistema de Evaluación y Sistema de Calificación:		Convocatoria ordinaria. E04 15% E03 25% E02 15% E11 23% E07 22% Convocatoria extraordinaria E07 70% E03 25% E04 5% Las calificaciones, de acuerdo con la legislación vigente, se realizan en una escala numérica de 0-10, con un decimal.
Observaciones:		
Complemento Formativo: Nivelación en Física. Carácter: Optativa/Obligatoria		
Ubicación Temporal y Duración:		M1, anual.
Competencias que el estudiante adquiere:		CB6, CB10, CG02, CG03, CE12.
Contenidos:		1er SEMESTRE TEMA I: CINEMÁTICA TEMA II: DINÁMICA DE UNA PARTÍCULA TEMA III: TRABAJO Y ENERGÍA TEMA IV: OSCILACIONES TEMA V: DINÁMICA DE UN SISTEMA DE PARTÍCULAS TEMA VI: INTRODUCCIÓN A LA DINÁMICA DE FLUIDOS 2º SEMESTRE TEMA VII: EL CAMPO ELÉCTRICO TEMA VIII: POTENCIAL Y ENERGÍA POTENCIAL ELÉCTRICA TEMA IX: DISPOSITIVOS Y CIRCUITOS ELÉCTRICOS TEMA X: CAMPO MAGNÉTICO E INDUCCIÓN MAGNÉTICA TEMA XI: MOVIMIENTO ONDULATORIO. ONDAS ELECTROMAGNÉTICAS Y ELEMENTOS DE ÓPTICA
Actividades Formativas:		
ACTIVIDAD	HORAS/CARACTER	COMPETENCIAS
A01	25 horas presenciales	CB6, CG02, CE12.
A05	14 horas presenciales	CB6, CG02, CG03, CE12.



A04	7 horas presenciales	CB6, CG02, CG03, CE12.
A03	4 horas presenciales	CB6, CG02, CE12.
A02	75 horas no presenciales	CB6, CB10, CG02, CG03, CE12.
Metodología Docente:		M01, M04, M06, M07.
Lengua en la que se imparte:		Castellano
Sistema de Evaluación y Sistema de Calificación:		Convocatoria ordinaria. E07 50% E02 20% E03 20% E05 10% Convocatoria extraordinaria. E05 15% E03 15% E07 70% Las calificaciones, de acuerdo con la legislación vigente, se realizan en una escala numérica de 0-10, con un decimal.

Complemento Formativo: Nivelación en Matemáticas. Carácter: Optativa/Obligatoria		
Ubicación Temporal y Duración:		M1, anual.
Competencias que el estudiante adquiere:		CB6, CB10, CG02, CG03, CE17.
Contenidos:		1. MATRICES Y SISTEMAS LINEALES 2. ESPACIOS VECTORIALES 3. APLICACIONES LINEALES 4. DETERMINANTES 5. ESTRUCTURA DE LOS ENDOMORFISMOS 6. DUALIDAD 7. TEMAS ADICIONALES: álgebra lineal sobre cuerpos finitos, espacios lineales de dimensión infinita.
Actividades Formativas:		
ACTIVIDAD	HORAS/CARACTER	COMPETENCIAS
A01	30 horas presenciales	CB6, CG02, CE17.
A05	20 horas presenciales	CB6, CG02, CG03, CE17.
A07	30 horas no presenciales	CB6, CB10, CG02, CE17.
A02	40 horas no presenciales	CB6, CB10, CG02, CG03, CE17.
A03	5 horas no presenciales	CB6, CB10, CG02, CE17.
Metodología Docente:		M01, M04, M06, M03.
Lengua en la que se imparte:		Castellano
Sistema de Evaluación y Sistema de Calificación:		Convocatoria ordinaria. E02 15% E05 15% E07 70% Convocatoria extraordinaria. E02 15% E05 15% E07 70% Las calificaciones, de acuerdo con la legislación vigente, se realizan en una escala numérica de 0-10, con un decimal.



5. PLANIFICACIÓN DE LAS ENSEÑANZAS

5.1 DESCRIPCIÓN DEL PLAN DE ESTUDIOS
Ver Apartado 5: Anexo 1.
5.2 ACTIVIDADES FORMATIVAS
Búsqueda bibliográfica y análisis de trabajos de investigación relacionados.
Posibilidad de estancia en una de las 32 universidades europeas, y de fuera de Europa, para la realización de parte de su trabajo de fin de máster. La estancia también se podrá realizar en uno de los centros de supercomputación asociados así como en una de las empresas participantes.
Elaboración de una memoria con los resultados del trabajo de fin de Máster y preparación de la presentación.
Asistencia a clases magistrales teóricas (ya sea en red o presencial): Presentaciones orales, apoyadas con material informático para todo el grupo en las que se transmitirán los contenidos fundamentales, revisados y actualizados, elaborados por el profesorado.
Estudio autónomo individual o en grupo.
Realización de exámenes escritos
Tutorías: trabajo personal bajo la supervisión de un tutor o tutora. Se analiza y discute con el tutor los datos obtenidos.
Clases prácticas: prácticas en aula de informática o laboratorios. Las clases en sesiones de dos horas como mínimo, incluirán una introducción teórica breve en la que el profesor o profesora expondrá los conceptos básicos y aplicaciones prácticas.
Elaboración de una memoria sobre los resultados experimentales obtenidos durante las prácticas: se valorará especialmente el espíritu crítico sobre el trabajo realizado así como la búsqueda bibliográfica realizada y el grado de conocimiento adquirido sobre ésta.
Elaboración de una memoria con ejercicios planteados en clase.
Exposición pública de trabajos por parte del estudiantado: individualmente o en grupo expondrán un trabajo relativo a temas actuales relacionados con la asignatura. Los estudiantes elaborarán un pequeño informe escrito y presentado/defendido en clase ante la profesora o profesor y el resto de estudiantes. Se valorará especialmente el espíritu crítico.
Preparación de seminarios o tutorías.
Asistencia a seminario: en estas sesiones cada estudiante obtendrá una visión práctica y actualizada de diversas técnicas mediante la asistencia a seminarios impartidos por expertos en el área.
5.3 METODOLOGÍAS DOCENTES
Lección magistral
Docencia en red: Se utilizará las distintas herramientas que ofrece la plataforma moodle (http://www.uam.es/moodle). 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 y las dudas sobre las metodologías empleadas.
Resolución de ejercicios prácticos (problemas numéricos, cuestiones tipo test, interpretación y procesamiento de la información, evaluación de publicaciones científicas, etc.).
Presentaciones orales de temas previamente preparados, incluyendo debate con compañeros y profesores.
Tutorías individuales o en grupos reducidos.
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.
Clases en aula de informática. La docencia se impartirá en un aula de informática. Las clases, en sesiones de dos 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.
5.4 SISTEMAS DE EVALUACIÓN
Asistencia y participación en las clases magistrales.
Realización de controles (tests) a lo largo del curso.
Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura.
Discusión en tutorías y/o seminarios sobre los ejercicios, trabajos o prácticas realizadas en la asignatura.
Evaluación continua del alumno/a mediante preguntas y cuestiones orales durante el desarrollo de las prácticas



Realización y defensa de un informe sobre los casos prácticos planteados por la profesora o profesor en clase.		
Realización de un examen escrito al final del curso		
Realización de un examen de carácter práctico al final del curso.		
Realización y defensa pública y oral ante un tribunal evaluador del informe escrito sobre el trabajo de investigación original realizado por el estudiante.		
Examen parcial.		
5.5 NIVEL 1: FUNDAMENTOS		
5.5.1 Datos Básicos del Nivel 1		
NIVEL 2: Competencia Científica y Lingüística Transversal		
5.5.1.1 Datos Básicos del Nivel 2		
CARÁCTER	Obligatoria	
ECTS NIVEL 2	5	
DESPLIEGUE TEMPORAL: Anual		
ECTS Anual 1	ECTS Anual 2	ECTS Anual 3
5		
ECTS Anual 4	ECTS Anual 5	ECTS Anual 6
LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
Sí	No	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Sí
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
No	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	
NO CONSTAN ELEMENTOS DE NIVEL 3		
5.5.1.2 RESULTADOS DE APRENDIZAJE		
<p>El estudiante será capaz de realizar búsquedas en recursos bibliográficos tipo Scopus o Web of Science, preparar una presentación clara y eficaz, conocerá el marco de financiación de los proyectos y tendrá las nociones necesarias para redactar un artículo científico.</p> <p>Además se fomentará el aprendizaje y aumento de competencias lingüísticas de una Lengua Europea</p>		
5.5.1.3 CONTENIDOS		
<ul style="list-style-type: none"> - Comunicación y difusión de la ciencia. - Escritura científica: los pasos para escribir un artículo. - Cómo utilizar las bases de datos de publicaciones científicas. - La financiación en la ciencia: cómo funciona el marco nacional y europeo. - Gestión de proyectos. - Lengua Europea 		
5.5.1.4 OBSERVACIONES		
5.5.1.5 COMPETENCIAS		
5.5.1.5.1 BÁSICAS Y GENERALES		
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.		



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.		
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.		
5.5.1.5.2 TRANSVERSALES		
CT02 - El/la estudiante es organizado en el trabajo demostrando que sabe gestionar el tiempo y los recursos de que dispone.		
CT04 - El/la estudiante tiene capacidad de generar nuevas ideas a partir de sus propias decisiones.		
CT07 - Saber comunicar y argumentar conocimientos, resultados y conclusiones de la investigación o práctica profesional a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades		
CT08 - Decidir y utilizar los procedimientos adecuados para conseguir financiación como investigador/a o como emprendedor/a		
CT12 - Fomentar en contextos académicos y profesionales el avance del conocimiento científico-tecnológico, social o cultural y su transferencia a la sociedad		
CT14 - Capacidad para producir contenidos digitales para la sociedad, fomentando la práctica de las nuevas tecnologías desde el compromiso con la seguridad y la ética profesional		
5.5.1.5.3 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.		
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.		
5.5.1.6 ACTIVIDADES FORMATIVAS		
ACTIVIDAD FORMATIVA	HORAS	PRESENCIALIDAD
Asistencia a clases magistrales teóricas (ya sea en red o presencial): Presentaciones orales, apoyadas con material informático para todo el grupo en las que se transmitirán los contenidos fundamentales, revisados y actualizados, elaborados por el profesorado.	20	100
Estudio autónomo individual o en grupo.	40	0
Tutorías: trabajo personal bajo la supervisión de un tutor o tutora. Se analiza y discute con el tutor los datos obtenidos.	3	100
Elaboración de una memoria con ejercicios planteados en clase.	35	0
Asistencia a seminario: en estas sesiones cada estudiante obtendrá una visión práctica y actualizada de diversas técnicas mediante la asistencia a seminarios impartidos por expertos en el área.	15	100
5.5.1.7 METODOLOGÍAS DOCENTES		
Lección magistral		
Docencia en red: Se utilizará las distintas herramientas que ofrece la plataforma moodle (http://www.uam.es/moodle). Publicación de contenidos de la asignatura, herramientas de trabajo en grupo: foros de discusión y wiki, correo electrónico.		
Presentaciones orales de temas previamente preparados, incluyendo debate con compañeros y profesores.		
Participación activa en tareas que permitan el desarrollo de destrezas comunicativas.		
5.5.1.8 SISTEMAS DE EVALUACIÓN		
SISTEMA DE EVALUACIÓN	PONDERACIÓN MÍNIMA	PONDERACIÓN MÁXIMA



Evaluación continua del alumno/a mediante preguntas y cuestiones orales durante el desarrollo de las prácticas	0.0	0.4
Realización de un examen de carácter práctico al final del curso.	0.0	0.6
NIVEL 2: Fundamentos matemáticos de la mecánica cuántica		
5.5.1.1 Datos Básicos del Nivel 2		
CARÁCTER	Obligatoria	
ECTS NIVEL 2	5	
DESPLIEGUE TEMPORAL: Anual		
ECTS Anual 1	ECTS Anual 2	ECTS Anual 3
5		
ECTS Anual 4	ECTS Anual 5	ECTS Anual 6
LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
Sí	No	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Sí
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
No	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	
NO CONSTAN ELEMENTOS DE NIVEL 3		
5.5.1.2 RESULTADOS DE APRENDIZAJE		
<p>Alcanzar las competencias generales y específicas de la materia y adquirir los conocimientos teóricos y prácticos descritos en sus contenidos. Desarrollar las competencias de carácter personal, interpersonal y vinculado al desarrollo ético y responsable de la profesión.</p>		
5.5.1.3 CONTENIDOS		
<p>1- Introducción y conceptos básicos de álgebra 2- Espacios funcionales 3- Postulados de la Mecánica Cuántica 4- Principales Teoremas en Mecánica Cuántica 5- Momento angular, Spin. Composición de momentos. 6- Métodos de variaciones y perturbaciones (independiente y dependiente del tiempo) 7- Partículas independientes e idénticas 8- Sistemas polieletrónicos 9- Segunda cuantización</p>		
5.5.1.4 OBSERVACIONES		
5.5.1.5 COMPETENCIAS		
5.5.1.5.1 BÁSICAS Y GENERALES		
<p>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.</p>		
<p>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.</p>		



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.		
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.		
5.5.1.5.2 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.		
5.5.1.5.3 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.		
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.		
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.		
CE17 - Los estudiantes comprenden y manejan las herramientas matemáticas requeridas para el desarrollo de la Química Teórica en sus aspectos fundamentales y sus aplicaciones.		
5.5.1.6 ACTIVIDADES FORMATIVAS		
ACTIVIDAD FORMATIVA	HORAS	PRESENCIALIDAD
Asistencia a clases magistrales teóricas (ya sea en red o presencial): Presentaciones orales, apoyadas con material informático para todo el grupo en las que se transmitirán los contenidos fundamentales, revisados y actualizados, elaborados por el profesorado.	30	100
Estudio autónomo individual o en grupo.	33	0
Elaboración de una memoria con ejercicios planteados en clase.	30	0
Preparación de seminarios o tutorías.	20	0
Asistencia a seminario: en estas sesiones cada estudiante obtendrá una visión práctica y actualizada de diversas técnicas mediante la asistencia a seminarios impartidos por expertos en el área.	12	100
5.5.1.7 METODOLOGÍAS DOCENTES		
Lección magistral		
Docencia en red: Se utilizará las distintas herramientas que ofrece la plataforma moodle (http://www.uam.es/moodle). 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 y las dudas sobre las metodologías empleadas.		
Tutorías individuales o en grupos reducidos.		
5.5.1.8 SISTEMAS DE EVALUACIÓN		
SISTEMA DE EVALUACIÓN	PONDERACIÓN MÍNIMA	PONDERACIÓN MÁXIMA



Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura.	0.0	0.6
Discusión en tutorías y/o seminarios sobre los ejercicios, trabajos o prácticas realizadas en la asignatura.	0.0	0.4
NIVEL 2: Mecánica estadística y aplicaciones en simulación		
5.5.1.1 Datos Básicos del Nivel 2		
CARÁCTER	Obligatoria	
ECTS NIVEL 2	5	
DESPLIEGUE TEMPORAL: Anual		
ECTS Anual 1	ECTS Anual 2	ECTS Anual 3
5		
ECTS Anual 4	ECTS Anual 5	ECTS Anual 6
LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
Sí	No	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Sí
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
No	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	
NO CONSTAN ELEMENTOS DE NIVEL 3		
5.5.1.2 RESULTADOS DE APRENDIZAJE		
<p>Alcanzar las competencias generales y específicas de la materia y adquirir los conocimientos teóricos y prácticos descritos en sus contenidos. Desarrollar las competencias de carácter personal, interpersonal y vinculado al desarrollo ético y responsable de la profesión.</p>		
5.5.1.3 CONTENIDOS		
<ol style="list-style-type: none"> 1. Colectivos y postulados de la mecánica estadística. 2. Colectivos microcanónico, canónico y grancanónico. 3. Estadísticas de Fermi-Dirac, Bose-Einstein y Boltzmann. 4. Mecánica estadística clásica. 5. Aplicaciones a sistemas ideales: gases ideales, gas ideal de fotones, fonones, electrones en metales. 6. Sistemas de partículas que interactúan: gases reales diluidos, segundo coeficiente del virial, ecuación de van der Waals. 7. Métodos Monte Carlo 8. Cálculo de propiedades termodinámicas y estructurales 9. Aspectos prácticos de la simulación por ordenador 		
5.5.1.4 OBSERVACIONES		
5.5.1.5 COMPETENCIAS		
5.5.1.5.1 BÁSICAS Y GENERALES		
<p>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.</p>		



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.		
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.		
5.5.1.5.2 TRANSVERSALES		
CT01 - El/la estudiante es capaz de adaptarse a diferentes entornos culturales demostrando que responde al cambio con flexibilidad.		
5.5.1.5.3 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.		
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.		
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 cuánticas y clásica a los sistemas ideales de interés en Química.		
5.5.1.6 ACTIVIDADES FORMATIVAS		
ACTIVIDAD FORMATIVA	HORAS	PRESENCIALIDAD
Asistencia a clases magistrales teóricas (ya sea en red o presencial): Presentaciones orales, apoyadas con material informático para todo el grupo en las que se transmitirán los contenidos fundamentales, revisados y actualizados, elaborados por el profesorado.	25	100
Estudio autónomo individual o en grupo.	40	0
Elaboración de una memoria con ejercicios planteados en clase.	30	0
Preparación de seminarios o tutorías.	20	0
Asistencia a seminario: en estas sesiones cada estudiante obtendrá una visión práctica y actualizada de diversas técnicas mediante la asistencia a seminarios impartidos por expertos en el área.	10	100
5.5.1.7 METODOLOGÍAS DOCENTES		
Lección magistral		
Docencia en red: Se utilizará las distintas herramientas que ofrece la plataforma moodle (http://www.uam.es/moodle). 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 y las dudas sobre las metodologías empleadas.		
Tutorías individuales o en grupos reducidos.		
5.5.1.8 SISTEMAS DE EVALUACIÓN		
SISTEMA DE EVALUACIÓN	PONDERACIÓN MÍNIMA	PONDERACIÓN MÁXIMA
Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura.	0.0	0.6



Discusión en tutorías y/o seminarios sobre los ejercicios, trabajos o prácticas realizadas en la asignatura.	0.0	0.4
NIVEL 2: Simetría en átomos, moléculas y sólidos		
5.5.1.1 Datos Básicos del Nivel 2		
CARÁCTER	Obligatoria	
ECTS NIVEL 2	5	
DESPLIEGUE TEMPORAL: Anual		
ECTS Anual 1	ECTS Anual 2	ECTS Anual 3
5		
ECTS Anual 4	ECTS Anual 5	ECTS Anual 6
LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
Sí	No	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Sí
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
No	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	
NO CONSTAN ELEMENTOS DE NIVEL 3		
5.5.1.2 RESULTADOS DE APRENDIZAJE		
<p>Alcanzar las competencias generales y específicas de la materia y adquirir los conocimientos teóricos y prácticos descritos en sus contenidos. Desarrollar las competencias de carácter personal, interpersonal y vinculado al desarrollo ético y responsable de la profesión.</p>		
5.5.1.3 CONTENIDOS		
<p>1. Aplicaciones de la teoría de grupos a átomos.</p> <p>2. Simetría en Moléculas:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Simetría: operaciones, grupos puntuales, representación matricial • Aplicaciones de la simetría en Química Cuántica. <p>3. Simetría en Sólidos:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Simetrías espaciales • Estructuras isotrópicas y anisotrópicas • Red recíproca de una red de Bravais. 		
5.5.1.4 OBSERVACIONES		
5.5.1.5 COMPETENCIAS		
5.5.1.5.1 BÁSICAS Y GENERALES		
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.		
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.		
5.5.1.5.2 TRANSVERSALES		
CT01 - El/la estudiante es capaz de adaptarse a diferentes entornos culturales demostrando que responde al cambio con flexibilidad.		
5.5.1.5.3 ESPECÍFICAS		
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.		
CE17 - Los estudiantes comprenden y manejan las herramientas matemáticas requeridas para el desarrollo de la Química Teórica en sus aspectos fundamentales y sus aplicaciones.		
5.5.1.6 ACTIVIDADES FORMATIVAS		
ACTIVIDAD FORMATIVA	HORAS	PRESENCIALIDAD
Asistencia a clases magistrales teóricas (ya sea en red o presencial): Presentaciones orales, apoyadas con material informático para todo el grupo en las que se transmitirán los contenidos fundamentales, revisados y actualizados, elaborados por el profesorado.	20	100
Estudio autónomo individual o en grupo.	35	0
Elaboración de una memoria con ejercicios planteados en clase.	30	0
Preparación de seminarios o tutorías.	20	0
Asistencia a seminario: en estas sesiones cada estudiante obtendrá una visión práctica y actualizada de diversas técnicas mediante la asistencia a seminarios impartidos por expertos en el área.	20	100
5.5.1.7 METODOLOGÍAS DOCENTES		
Lección magistral		
Docencia en red: Se utilizará las distintas herramientas que ofrece la plataforma moodle (http://www.uam.es/moodle). 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 y las dudas sobre las metodologías empleadas.		
Tutorías individuales o en grupos reducidos.		
5.5.1.8 SISTEMAS DE EVALUACIÓN		
SISTEMA DE EVALUACIÓN	PONDERACIÓN MÍNIMA	PONDERACIÓN MÁXIMA
Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura.	0.0	0.6
Discusión en tutorías y/o seminarios sobre los ejercicios, trabajos o prácticas realizadas en la asignatura.	0.0	0.4
5.5 NIVEL 1: MÉTODOS		
5.5.1 Datos Básicos del Nivel 1		
NIVEL 2: Técnicas computacionales y cálculo numérico		
5.5.1.1 Datos Básicos del Nivel 2		
CARÁCTER	Obligatoria	
ECTS NIVEL 2	5	
DESPLIEGUE TEMPORAL: Anual		



ECTS Anual 1	ECTS Anual 2	ECTS Anual 3
5		
ECTS Anual 4	ECTS Anual 5	ECTS Anual 6
LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
Sí	No	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Sí
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
No	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	
NO CONSTAN ELEMENTOS DE NIVEL 3		
5.5.1.2 RESULTADOS DE APRENDIZAJE		
<p>Alcanzar las competencias generales y específicas de la materia y adquirir los conocimientos teóricos y prácticos descritos en sus contenidos. Desarrollar las competencias de carácter personal, interpersonal y vinculado al desarrollo ético y responsable de la profesión.</p>		
5.5.1.3 CONTENIDOS		
<p>Algoritmos y Programación. Programación FORTRAN. Cálculo matricial. Cálculo Integral. Búsqueda de ceros y optimización de funciones. Análisis multivariante.</p>		
5.5.1.4 OBSERVACIONES		
5.5.1.5 COMPETENCIAS		
5.5.1.5.1 BÁSICAS Y GENERALES		
<p>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.</p>		
<p>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.</p>		
<p>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</p>		
<p>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</p>		
<p>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</p>		
<p>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</p>		
<p>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.</p>		
5.5.1.5.2 TRANSVERSALES		
<p>CT01 - El/la estudiante es capaz de adaptarse a diferentes entornos culturales demostrando que responde al cambio con flexibilidad.</p>		



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.		
5.5.1.5.3 ESPECÍFICAS		
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.		
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.		
5.5.1.6 ACTIVIDADES FORMATIVAS		
ACTIVIDAD FORMATIVA	HORAS	PRESENCIALIDAD
Asistencia a clases magistrales teóricas (ya sea en red o presencial): Presentaciones orales, apoyadas con material informático para todo el grupo en las que se transmitirán los contenidos fundamentales, revisados y actualizados, elaborados por el profesorado.	20	100
Estudio autónomo individual o en grupo.	40	0
Tutorías: trabajo personal bajo la supervisión de un tutor o tutora. Se analiza y discute con el tutor los datos obtenidos.	8	100
Elaboración de una memoria sobre los resultados experimentales obtenidos durante las prácticas: se valorará especialmente el espíritu crítico sobre el trabajo realizado así como la búsqueda bibliográfica realizada y el grado de conocimiento adquirido sobre ésta.	30	0
Preparación de seminarios o tutorías.	20	0
Asistencia a seminario: en estas sesiones cada estudiante obtendrá una visión práctica y actualizada de diversas técnicas mediante la asistencia a seminarios impartidos por expertos en el área.	7	100
5.5.1.7 METODOLOGÍAS DOCENTES		
Lección magistral		
Docencia en red: Se utilizará las distintas herramientas que ofrece la plataforma moodle (http://www.uam.es/moodle). 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 y las dudas sobre las metodologías empleadas.		
Tutorías individuales o en grupos reducidos.		
Clases en aula de informática. La docencia se impartirá en un aula de informática. Las clases, en sesiones de dos 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.		
5.5.1.8 SISTEMAS DE EVALUACIÓN		
SISTEMA DE EVALUACIÓN	PONDERACIÓN MÍNIMA	PONDERACIÓN MÁXIMA
Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura.	0.0	0.0
Discusión en tutorías y/o seminarios sobre los ejercicios, trabajos o prácticas realizadas en la asignatura.	0.0	0.0
NIVEL 2: Métodos de la química teórica I		



5.5.1.1 Datos Básicos del Nivel 2		
CARÁCTER	Obligatoria	
ECTS NIVEL 2	5	
DESPLIEGUE TEMPORAL: Anual		
ECTS Anual 1	ECTS Anual 2	ECTS Anual 3
5		
ECTS Anual 4	ECTS Anual 5	ECTS Anual 6
LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
Sí	No	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Sí
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
No	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	
NO CONSTAN ELEMENTOS DE NIVEL 3		
5.5.1.2 RESULTADOS DE APRENDIZAJE		
<p>Alcanzar las competencias generales y específicas de la materia y adquirir los conocimientos teóricos y prácticos descritos en sus contenidos. Desarrollar las competencias de carácter personal, interpersonal y vinculado al desarrollo ético y responsable de la profesión.</p>		
5.5.1.3 CONTENIDOS		
<p>1. Métodos Ab initio:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Metodo de Hartree-Fock: RHF y UHF • Funciones de base, pseudopotenciales y potenciales efectivos. • Teoría de perturbaciones Moller-Plesset • Visión general de métodos no perturbacionales basados en función de onda: Métodos de interacción de configuraciones, Métodos CoupledCluster, Métodos Multiconfiguracionales <p>2. Teoría del Funcional de la Densidad:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Conceptos preliminares. Teoremas de Hohenberg-Kohn. • Método de Kohn-Sham. • Aproximaciones al potencial de intercambio-correlación • DFT conceptual 		
5.5.1.4 OBSERVACIONES		
5.5.1.5 COMPETENCIAS		
5.5.1.5.1 BÁSICAS Y GENERALES		
<p>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.</p>		
<p>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.</p>		
<p>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</p>		
<p>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</p>		
<p>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</p>		



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.

5.5.1.5.2 TRANSVERSALES

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

5.5.1.5.3 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.

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.

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.

5.5.1.6 ACTIVIDADES FORMATIVAS

ACTIVIDAD FORMATIVA	HORAS	PRESENCIALIDAD
Asistencia a clases magistrales teóricas (ya sea en red o presencial): Presentaciones orales, apoyadas con material informático para todo el grupo en las que se transmitirán los contenidos fundamentales, revisados y actualizados, elaborados por el profesorado.	20	100
Estudio autónomo individual o en grupo.	40	0
Elaboración de una memoria con ejercicios planteados en clase.	30	0
Preparación de seminarios o tutorías.	20	0
Asistencia a seminario: en estas sesiones cada estudiante obtendrá una visión práctica y actualizada de diversas técnicas mediante la asistencia a seminarios impartidos por expertos en el área.	15	100

5.5.1.7 METODOLOGÍAS DOCENTES

Lección magistral

Docencia en red: Se utilizará las distintas herramientas que ofrece la plataforma moodle (<http://www.uam.es/moodle>). 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 y las dudas sobre las metodologías empleadas.

Tutorías individuales o en grupos reducidos.

5.5.1.8 SISTEMAS DE EVALUACIÓN

SISTEMA DE EVALUACIÓN	PONDERACIÓN MÍNIMA	PONDERACIÓN MÁXIMA
Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura.	0.0	0.6
Discusión en tutorías y/o seminarios sobre los ejercicios, trabajos o prácticas realizadas en la asignatura.	0.0	0.4

NIVEL 2: Métodos de la química teórica II

5.5.1.1 Datos Básicos del Nivel 2

CARÁCTER	Obligatoria
ECTS NIVEL 2	5



DESPLIEGUE TEMPORAL: Anual		
ECTS Anual 1	ECTS Anual 2	ECTS Anual 3
5		
ECTS Anual 4	ECTS Anual 5	ECTS Anual 6
LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
Sí	No	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Sí
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
No	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	
NO CONSTAN ELEMENTOS DE NIVEL 3		
5.5.1.2 RESULTADOS DE APRENDIZAJE		
<p>Alcanzar las competencias generales y específicas de la materia y adquirir los conocimientos teóricos y prácticos descritos en sus contenidos. Desarrollar las competencias de carácter personal, interpersonal y vinculado al desarrollo ético y responsable de la profesión.</p>		
5.5.1.3 CONTENIDOS		
<ul style="list-style-type: none"> - Ecuación de Schödinger dependiente del tiempo. - Dinámicas ab initio: Métodos basados en la ecuación de Ehrenfest, Born-Oppenheimer Molecular Dynamics, Carr-Parrinello Molecular Dynamics. - Mecánica Molecular, fuerzas intermoleculares. campos de fuerza y estrategias de parametrización - Métodos QM/MM - Métodos de solvente: modelos discretos, continuos, mixtos. 		
5.5.1.4 OBSERVACIONES		
5.5.1.5 COMPETENCIAS		
5.5.1.5.1 BÁSICAS Y GENERALES		
<p>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.</p>		
<p>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.</p>		
<p>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</p>		
<p>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</p>		
<p>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</p>		
<p>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</p>		
<p>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.</p>		
5.5.1.5.2 TRANSVERSALES		
<p>CT01 - El/la estudiante es capaz de adaptarse a diferentes entornos culturales demostrando que responde al cambio con flexibilidad.</p>		
5.5.1.5.3 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.		
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.		
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.		
CE16 - El/la estudiante es capaz de discernir entre los diferentes métodos existentes y cómo seleccionar el más adecuado para cada problema.		
5.5.1.6 ACTIVIDADES FORMATIVAS		
ACTIVIDAD FORMATIVA	HORAS	PRESENCIALIDAD
Asistencia a clases magistrales teóricas (ya sea en red o presencial): Presentaciones orales, apoyadas con material informático para todo el grupo en las que se transmitirán los contenidos fundamentales, revisados y actualizados, elaborados por el profesorado.	20	100
Estudio autónomo individual o en grupo.	40	0
Elaboración de una memoria con ejercicios planteados en clase.	30	0
Preparación de seminarios o tutorías.	20	0
Asistencia a seminario: en estas sesiones cada estudiante obtendrá una visión práctica y actualizada de diversas técnicas mediante la asistencia a seminarios impartidos por expertos en el área.	15	100
5.5.1.7 METODOLOGÍAS DOCENTES		
Lección magistral		
Docencia en red: Se utilizará las distintas herramientas que ofrece la plataforma moodle (http://www.uam.es/moodle). 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 y las dudas sobre las metodologías empleadas.		
Tutorías individuales o en grupos reducidos.		
5.5.1.8 SISTEMAS DE EVALUACIÓN		
SISTEMA DE EVALUACIÓN	PONDERACIÓN MÍNIMA	PONDERACIÓN MÁXIMA
Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura.	0.0	0.0
Discusión en tutorías y/o seminarios sobre los ejercicios, trabajos o prácticas realizadas en la asignatura.	0.0	0.0
5.5 NIVEL 1: OPTATIVIDAD		
5.5.1 Datos Básicos del Nivel 1		
NIVEL 2: Profundización en los métodos de la química teórica		
5.5.1.1 Datos Básicos del Nivel 2		
CARÁCTER	Optativa	
ECTS NIVEL 2	5	
DESPLIEGUE TEMPORAL: Anual		
ECTS Anual 1	ECTS Anual 2	ECTS Anual 3
5		
ECTS Anual 4	ECTS Anual 5	ECTS Anual 6



LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
Sí	No	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	No
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
No	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	
LISTADO DE ESPECIALIDADES		
No existen datos		
NO CONSTAN ELEMENTOS DE NIVEL 3		
5.5.1.2 RESULTADOS DE APRENDIZAJE		
<p>Alcanzar las competencias generales y específicas de la materia y adquirir los conocimientos teóricos y prácticos descritos en sus contenidos. Desarrollar las competencias de carácter personal, interpersonal y vinculado al desarrollo ético y responsable de la profesión.</p>		
5.5.1.3 CONTENIDOS		
<ul style="list-style-type: none"> - Integrales moleculares. Propiedades y técnicas de cálculo. - Ecuaciones SCF. Convergencia. Métodos de escalado lineal. - Teoría de Perturbaciones. Convergencia de MPn. Diagramas. Teorema de linkedclusters. - Métodos locales de correlación electrónica. Local Pair Natural Orbitals - Combinación de Energías de Fragmentos Moleculares - Eficiencia y escalado de los métodos. Coste computacional. - Métodos explícitamente correlacionados. 		
5.5.1.4 OBSERVACIONES		
5.5.1.5 COMPETENCIAS		
5.5.1.5.1 BÁSICAS Y GENERALES		
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.		
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.		
5.5.1.5.2 TRANSVERSALES		
CT02 - El/la estudiante es organizado en el trabajo demostrando que sabe gestionar el tiempo y los recursos de que dispone.		
5.5.1.5.3 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.		
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.		
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.		
5.5.1.6 ACTIVIDADES FORMATIVAS		
ACTIVIDAD FORMATIVA	HORAS	PRESENCIALIDAD
Asistencia a clases magistrales teóricas (ya sea en red o presencial): Presentaciones orales, apoyadas con material informático para todo el grupo en las que se transmitirán los contenidos fundamentales, revisados y actualizados, elaborados por el profesorado.	20	100
Estudio autónomo individual o en grupo.	40	0
Elaboración de una memoria con ejercicios planteados en clase.	30	0
Preparación de seminarios o tutorías.	20	0
Asistencia a seminario: en estas sesiones cada estudiante obtendrá una visión práctica y actualizada de diversas técnicas mediante la asistencia a seminarios impartidos por expertos en el área.	15	100
5.5.1.7 METODOLOGÍAS DOCENTES		
Lección magistral		
Docencia en red: Se utilizará las distintas herramientas que ofrece la plataforma moodle (http://www.uam.es/moodle). 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 y las dudas sobre las metodologías empleadas.		
Tutorías individuales o en grupos reducidos.		
5.5.1.8 SISTEMAS DE EVALUACIÓN		
SISTEMA DE EVALUACIÓN	PONDERACIÓN MÍNIMA	PONDERACIÓN MÁXIMA
Asistencia y participación en las clases magistrales.	0.0	0.1
Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura.	0.0	0.6
Discusión en tutorías y/o seminarios sobre los ejercicios, trabajos o prácticas realizadas en la asignatura.	0.0	0.3
NIVEL 2: Dinámica de las reacciones químicas		
5.5.1.1 Datos Básicos del Nivel 2		
CARÁCTER	Optativa	
ECTS NIVEL 2	5	
DESPLIEGUE TEMPORAL: Anual		
ECTS Anual 1	ECTS Anual 2	ECTS Anual 3
5		
ECTS Anual 4	ECTS Anual 5	ECTS Anual 6
LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE		



CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
Sí	No	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Sí
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
No	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	
LISTADO DE ESPECIALIDADES		
No existen datos		
NO CONSTAN ELEMENTOS DE NIVEL 3		
5.5.1.2 RESULTADOS DE APRENDIZAJE		
<p>Alcanzar las competencias generales y específicas de la materia y adquirir los conocimientos teóricos y prácticos descritos en sus contenidos. Desarrollar las competencias de carácter personal, interpersonal y vinculado al desarrollo ético y responsable de la profesión.</p>		
5.5.1.3 CONTENIDOS		
<ul style="list-style-type: none"> - Reacciones químicas a escala microscópica: colisiones moleculares. - Scattering y potencial: caso elástico. Observables experimentales. - Superficies de energía potencial. Colisiones inelásticas y reactivas. - Métodos teóricos en Dinámica Molecular: <ul style="list-style-type: none"> • Método de trayectorias. • Cálculos mecano-cuánticos. - Aspectos experimentales de la Dinámica de Reacciones Químicas. - Dinámica en estados excitados <ul style="list-style-type: none"> • Propagación de paquetes de onda • Funciones de correlación • Espectroscopia Pump-Probe • Dinámicas Norn-Oppenheimer y de Ehrenfest <p>Dinámicas no adiabáticas: Tullysurfacehopping.</p>		
5.5.1.4 OBSERVACIONES		
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.		
5.5.1.5 COMPETENCIAS		
5.5.1.5.1 BÁSICAS Y GENERALES		
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.		
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		
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.		
5.5.1.5.2 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.		
5.5.1.5.3 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.		
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.		
5.5.1.6 ACTIVIDADES FORMATIVAS		
ACTIVIDAD FORMATIVA	HORAS	PRESENCIALIDAD
Asistencia a clases magistrales teóricas (ya sea en red o presencial): Presentaciones orales, apoyadas con material informático para todo el grupo en las que se transmitirán los contenidos fundamentales, revisados y actualizados, elaborados por el profesorado.	30	100
Estudio autónomo individual o en grupo.	50	0
Elaboración de una memoria con ejercicios planteados en clase.	40	0
Exposición pública de trabajos por parte del estudiantado: individualmente o en grupo expondrán un trabajo relativo a temas actuales relacionados con la asignatura. Los estudiantes elaborarán un pequeño informe escrito y presentado/ defendido en clase ante la profesora o profesor y el resto de estudiantes. Se valorará especialmente el espíritu crítico.	5	100
5.5.1.7 METODOLOGÍAS DOCENTES		
Lección magistral		
Docencia en red: Se utilizará las distintas herramientas que ofrece la plataforma moodle (http://www.uam.es/moodle). 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 y las dudas sobre las metodologías empleadas.		
Tutorías individuales o en grupos reducidos.		
Clases en aula de informática. La docencia se impartirá en un aula de informática. Las clases, en sesiones de dos 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.		
5.5.1.8 SISTEMAS DE EVALUACIÓN		
SISTEMA DE EVALUACIÓN	PONDERACIÓN MÍNIMA	PONDERACIÓN MÁXIMA
Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura.	0.0	0.6
Discusión en tutorías y/o seminarios sobre los ejercicios, trabajos o prácticas realizadas en la asignatura.	0.0	0.4
NIVEL 2: Estados excitados		
5.5.1.1 Datos Básicos del Nivel 2		
CARÁCTER	Optativa	



ECTS NIVEL 2		5	
DESPLIEGUE TEMPORAL: Anual			
ECTS Anual 1		ECTS Anual 2	
5			
ECTS Anual 4		ECTS Anual 5	
LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE			
CASTELLANO		CATALÁN	
Sí		No	
GALLEGO		VALENCIANO	
No		No	
FRANCÉS		ALEMÁN	
No		No	
ITALIANO		OTRAS	
No		No	
LISTADO DE ESPECIALIDADES			
No existen datos			
NO CONSTAN ELEMENTOS DE NIVEL 3			
5.5.1.2 RESULTADOS DE APRENDIZAJE			
<p>Alcanzar las competencias generales y específicas de la materia y adquirir los conocimientos teóricos y prácticos descritos en sus contenidos. Desarrollar las competencias de carácter personal, interpersonal y vinculado al desarrollo ético y responsable de la profesión.</p>			
5.5.1.3 CONTENIDOS			
<p>1. Funciones de energía potencial nuclear</p> <ul style="list-style-type: none"> • Aproximación de Born-Oppenheimer • Curvas de energía potencial de moléculas diatómicas • Superficies de energía potencial de moléculas poliatómicas <p>2. Interacción de la radiación y la materia</p> <ul style="list-style-type: none"> • Modelo clásico de la radiación electromagnética • Probabilidad de transición inducida por la radiación <p>3. Espectros roviibracionales:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Moléculas diatómicas: niveles de energía y reglas de selección • Espectros rotacionales puros y roviibracionales en diatómicas. • Moléculas poliatómicas: vibraciones clásica y vibraciones cuánticas. • Espectros roviibracionales en poliatómicas. • Relajación vibracional en líquidos: métodos experimentales y tratamientos teóricos <p>4. Conceptos básicos en Fotoquímica Molecular</p> <ul style="list-style-type: none"> • Espectroscopía electrónica teórica; simetría, reglas de selección, naturaleza del estado excitado, acoplamiento vibrónico. • Superficies de energía potencial: puntos estacionarios, cruces entre superficies, caminos de mínima energía. • Procesos fotoquímicos: intersecciones cónicas, reacciones fotoinducidas. <p>5. Espectro electrónico: métodos multiconfiguracionales.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Métodos de cálculo de la estructura electrónica en el estado excitado. • Métodos Multiconfiguracionales: CASSCF and RASSCF. • Problemas prácticos: elección del espacio activo, cálculos a un estado vs cálculos "state-average". Consideraciones sobre las bases de cálculo • El método CASPT2. • Problemas en el método CASPT2 y soluciones: estados intrusos, cruces evitados, mezcla de estados de valencia-Rydberg <p>6. Espectro electrónico: métodos TD-DFT</p> <p>Linear response TDDFT, propagación de la densidad electrónica. Cálculo de espectros, aproximación a los funcionales de intercambio y correlación. Ejemplos.</p>			
5.5.1.4 OBSERVACIONES			



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.		
5.5.1.5 COMPETENCIAS		
5.5.1.5.1 BÁSICAS Y GENERALES		
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.		
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		
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.		
5.5.1.5.2 TRANSVERSALES		
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.		
5.5.1.5.3 ESPECÍFICAS		
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.		
5.5.1.6 ACTIVIDADES FORMATIVAS		
ACTIVIDAD FORMATIVA	HORAS	PRESENCIALIDAD
Asistencia a clases magistrales teóricas (ya sea en red o presencial): Presentaciones orales, apoyadas con material informático para todo el grupo en las que se transmitirán los contenidos fundamentales, revisados y actualizados, elaborados por el profesorado.	35	100
Estudio autónomo individual o en grupo.	50	0
Elaboración de una memoria con ejercicios planteados en clase.	40	0
5.5.1.7 METODOLOGÍAS DOCENTES		
Lección magistral		
Docencia en red: Se utilizará las distintas herramientas que ofrece la plataforma moodle (http://www.uam.es/moodle). 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 y las dudas sobre las metodologías empleadas.		
Tutorías individuales o en grupos reducidos.		
5.5.1.8 SISTEMAS DE EVALUACIÓN		
SISTEMA DE EVALUACIÓN	PONDERACIÓN MÍNIMA	PONDERACIÓN MÁXIMA
Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura.	0.0	0.6
Discusión en tutorías y/o seminarios sobre los ejercicios, trabajos o prácticas realizadas en la asignatura.	0.0	0.4
NIVEL 2: Sólidos		



5.5.1.1 Datos Básicos del Nivel 2		
CARÁCTER	Optativa	
ECTS NIVEL 2	5	
DESPLIEGUE TEMPORAL: Anual		
ECTS Anual 1	ECTS Anual 2	ECTS Anual 3
5		
ECTS Anual 4	ECTS Anual 5	ECTS Anual 6
LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
Sí	No	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Sí
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
No	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	
LISTADO DE ESPECIALIDADES		
No existen datos		
NO CONSTAN ELEMENTOS DE NIVEL 3		
5.5.1.2 RESULTADOS DE APRENDIZAJE		
<p>Alcanzar las competencias generales y específicas de la materia y adquirir los conocimientos teóricos y prácticos descritos en sus contenidos. Desarrollar las competencias de carácter personal, interpersonal y vinculado al desarrollo ético y responsable de la profesión.</p>		
5.5.1.3 CONTENIDOS		
<p>1. Theoretical Models</p> <ul style="list-style-type: none"> Theoretical Models in Surface and Materials Science The Cluster Model Periodic Models Case studies: adsorption in metal oxides and nitrides <p>2. Solids</p> <ul style="list-style-type: none"> Geometry and symmetry of crystals Thermodynamic properties of a pure crystal The free electron model Tight-binding methods General electronic structure methods <p>3. Applications</p> <ul style="list-style-type: none"> Ab initio calculation of the electronic structure of solids. Ab initio simulation of magnetic and optical properties of impurities and structural instabilities of solids Molecular dynamics : Car Parrinello Ab initio simulation of the structure, thermodynamic properties and reactivity in surfaces. Hot topics in solid state chemistry 		
5.5.1.4 OBSERVACIONES		
CE28. Proporciona la metodología básica para el tratamiento de sistemas periódicos, cristales y polímeros.		
5.5.1.5 COMPETENCIAS		
5.5.1.5.1 BÁSICAS Y GENERALES		
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.		
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		
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.		
5.5.1.5.2 TRANSVERSALES		
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.		
5.5.1.5.3 ESPECÍFICAS		
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.		
5.5.1.6 ACTIVIDADES FORMATIVAS		
ACTIVIDAD FORMATIVA	HORAS	PRESENCIALIDAD
Asistencia a clases magistrales teóricas (ya sea en red o presencial): Presentaciones orales, apoyadas con material informático para todo el grupo en las que se transmitirán los contenidos fundamentales, revisados y actualizados, elaborados por el profesorado.	50	100
Estudio autónomo individual o en grupo.	45	0
Elaboración de una memoria con ejercicios planteados en clase.	30	0
5.5.1.7 METODOLOGÍAS DOCENTES		
Lección magistral		
Docencia en red: Se utilizará las distintas herramientas que ofrece la plataforma moodle (http://www.uam.es/moodle). Publicación de contenidos de la asignatura, herramientas de trabajo en grupo: foros de discusión y wiki, correo electrónico.		
Resolución de ejercicios prácticos (problemas numéricos, cuestiones tipo test, interpretación y procesamiento de la información, evaluación de publicaciones científicas, etc.).		
Orientación y supervisión en la preparación de informes o memorias escritas.		
5.5.1.8 SISTEMAS DE EVALUACIÓN		
SISTEMA DE EVALUACIÓN	PONDERACIÓN MÍNIMA	PONDERACIÓN MÁXIMA
Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura.	0.0	0.6
Discusión en tutorías y/o seminarios sobre los ejercicios, trabajos o prácticas realizadas en la asignatura.	0.0	0.4
NIVEL 2: Linux y linux ge gestión		
5.5.1.1 Datos Básicos del Nivel 2		
CARÁCTER	Optativa	
ECTS NIVEL 2	5	
DESPLIEGUE TEMPORAL: Anual		



ECTS Anual 1	ECTS Anual 2	ECTS Anual 3
5		
ECTS Anual 4	ECTS Anual 5	ECTS Anual 6
LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
Sí	No	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Sí
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
No	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	
LISTADO DE ESPECIALIDADES		
No existen datos		
NO CONSTAN ELEMENTOS DE NIVEL 3		
5.5.1.2 RESULTADOS DE APRENDIZAJE		
<p>Alcanzar las competencias generales y específicas de la materia y adquirir los conocimientos teóricos y prácticos descritos en sus contenidos. Desarrollar las competencias de carácter personal, interpersonal y vinculado al desarrollo ético y responsable de la profesión.</p>		
5.5.1.3 CONTENIDOS		
<p>Hardware.</p> <p>Sistemas operativos tipo UNIX/Linux. Diferentes variantes.</p> <p>Comandos fundamentales.</p> <p>Editor vi.</p> <p>Sistemas de archivos.</p> <p>Administración de sistemas.</p> <p>Programación en shell scripts</p>		
5.5.1.4 OBSERVACIONES		
<p>CE23. Los estudiantes tienen conocimientos tanto a nivel de usuario como de administrador de sistema 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.</p>		
5.5.1.5 COMPETENCIAS		
5.5.1.5.1 BÁSICAS Y GENERALES		
<p>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.</p>		
<p>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.</p>		
<p>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</p>		
<p>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</p>		
<p>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</p>		
<p>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</p>		



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.		
5.5.1.5.2 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.		
5.5.1.5.3 ESPECÍFICAS		
No existen datos		
5.5.1.6 ACTIVIDADES FORMATIVAS		
ACTIVIDAD FORMATIVA	HORAS	PRESENCIALIDAD
Asistencia a clases magistrales teóricas (ya sea en red o presencial): Presentaciones orales, apoyadas con material informático para todo el grupo en las que se transmitirán los contenidos fundamentales, revisados y actualizados, elaborados por el profesorado.	40	100
Estudio autónomo individual o en grupo.	35	0
Tutorías: trabajo personal bajo la supervisión de un tutor o tutora. Se analiza y discute con el tutor los datos obtenidos.	10	100
Elaboración de una memoria sobre los resultados experimentales obtenidos durante las prácticas: se valorará especialmente el espíritu crítico sobre el trabajo realizado así como la búsqueda bibliográfica realizada y el grado de conocimiento adquirido sobre ésta.	30	0
Preparación de seminarios o tutorías.	10	0
5.5.1.7 METODOLOGÍAS DOCENTES		
Lección magistral		
Docencia en red: Se utilizará las distintas herramientas que ofrece la plataforma moodle (http://www.uam.es/moodle). Publicación de contenidos de la asignatura, herramientas de trabajo en grupo: foros de discusión y wiki, correo electrónico.		
Orientación y supervisión en la preparación de informes o memorias escritas.		
Clases en aula de informática. La docencia se impartirá en un aula de informática. Las clases, en sesiones de dos 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.		
5.5.1.8 SISTEMAS DE EVALUACIÓN		
SISTEMA DE EVALUACIÓN	PONDERACIÓN MÍNIMA	PONDERACIÓN MÁXIMA
Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura.	0.0	0.6
Discusión en tutorías y/o seminarios sobre los ejercicios, trabajos o prácticas realizadas en la asignatura.	0.0	0.4
NIVEL 2: Laboratorio de química teórica aplicada		
5.5.1.1 Datos Básicos del Nivel 2		
CARÁCTER	Optativa	
ECTS NIVEL 2	5	
DESPLIEGUE TEMPORAL: Anual		



ECTS Anual 1	ECTS Anual 2	ECTS Anual 3
5		
ECTS Anual 4	ECTS Anual 5	ECTS Anual 6
LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
Sí	No	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Sí
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
No	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	
LISTADO DE ESPECIALIDADES		
No existen datos		
NO CONSTAN ELEMENTOS DE NIVEL 3		
5.5.1.2 RESULTADOS DE APRENDIZAJE		
<p>Alcanzar las competencias generales y específicas de la materia y adquirir los conocimientos teóricos y prácticos descritos en sus contenidos. Desarrollar las competencias de carácter personal, interpersonal y vinculado al desarrollo ético y responsable de la profesión.</p>		
5.5.1.3 CONTENIDOS		
<p>1. Introducción a la investigación científica: Búsquedas de bibliografía, presentación de trabajos científicos.</p> <p>2. Herramientas informáticas: Acceso a centros de cálculo, herramientas de visualización en química, herramientas de representación gráfica, herramientas matemáticas.</p> <p>3. Programas habituales de cálculo en Química Cuántica: Gaussian , Molcas, Molpro, etc..</p> <p>4. Programas de cálculo de sistemas periódicos: VASP, CRYSTAL, etc.</p>		
5.5.1.4 OBSERVACIONES		
5.5.1.5 COMPETENCIAS		
5.5.1.5.1 BÁSICAS Y GENERALES		
<p>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.</p>		
<p>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.</p>		
<p>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</p>		
<p>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</p>		
<p>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</p>		
<p>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</p>		



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.		
5.5.1.5.2 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.		
5.5.1.5.3 ESPECÍFICAS		
No existen datos		
5.5.1.6 ACTIVIDADES FORMATIVAS		
ACTIVIDAD FORMATIVA	HORAS	PRESENCIALIDAD
Estudio autónomo individual o en grupo.	35	0
Tutorías: trabajo personal bajo la supervisión de un tutor o tutora. Se analiza y discute con el tutor los datos obtenidos.	10	100
Clases prácticas: prácticas en aula de informática o laboratorios. Las clases en sesiones de dos horas como mínimo, incluirán una introducción teórica breve en la que el profesor o profesora expondrá los conceptos básicos y aplicaciones prácticas.	40	100
Elaboración de una memoria sobre los resultados experimentales obtenidos durante las prácticas: se valorará especialmente el espíritu crítico sobre el trabajo realizado así como la búsqueda bibliográfica realizada y el grado de conocimiento adquirido sobre ésta.	30	0
Preparación de seminarios o tutorías.	10	0
5.5.1.7 METODOLOGÍAS DOCENTES		
Lección magistral		
Docencia en red: Se utilizará las distintas herramientas que ofrece la plataforma moodle (http://www.uam.es/moodle). Publicación de contenidos de la asignatura, herramientas de trabajo en grupo: foros de discusión y wiki, correo electrónico.		
Tutorías individuales o en grupos reducidos.		
Clases en aula de informática. La docencia se impartirá en un aula de informática. Las clases, en sesiones de dos 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.		
5.5.1.8 SISTEMAS DE EVALUACIÓN		
SISTEMA DE EVALUACIÓN	PONDERACIÓN MÍNIMA	PONDERACIÓN MÁXIMA
Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura.	0.0	0.6
Discusión en tutorías y/o seminarios sobre los ejercicios, trabajos o prácticas realizadas en la asignatura.	0.0	0.4
NIVEL 2: Láseres		
5.5.1.1 Datos Básicos del Nivel 2		
CARÁCTER	Optativa	
ECTS NIVEL 2	5	
DESPLIEGUE TEMPORAL: Anual		
ECTS Anual 1	ECTS Anual 2	ECTS Anual 3



5		
ECTS Anual 4	ECTS Anual 5	ECTS Anual 6
LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
Sí	No	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Sí
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
No	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	
LISTADO DE ESPECIALIDADES		
No existen datos		
NO CONSTAN ELEMENTOS DE NIVEL 3		
5.5.1.2 RESULTADOS DE APRENDIZAJE		
<p>Alcanzar las competencias generales y específicas de la materia y adquirir los conocimientos teóricos y prácticos descritos en sus contenidos. Desarrollar las competencias de carácter personal, interpersonal y vinculado al desarrollo ético y responsable de la profesión.</p>		
5.5.1.3 CONTENIDOS		
<p>1. Introducción. ¿Qué es un láser? ¿Para qué se usa? Características de la luz láser.</p> <p>2. Propiedades del láser. Niveles de energía. Formación de líneas espectrales: coeficientes de Einstein. Emisión espontánea y estimulada. Inversión de población y saturación. Ensanchamiento de líneas espectrales. Ejemplos prácticos de láseres.</p> <p>3. Láseres de onda continua (cw) y láseres pulsados. Generación de láseres de onda continua. Reducción del ancho de banda. Formación de láseres pulsados por Q-switching y por modelocking. Segundo armónico. Pulsos láseres de atosegundos y trenes de pulsos de atosegundos.</p> <p>4. Interacción láser-materia. Descripción clásica y cuántica. Procesos multifotónicos y efecto túnel. Modelo de los tres pasos. Generación de armónicos altos. Doble ionización. Moléculas: aproximación de Born-Oppenheimer. Explosión coulombiana.</p> <p>5. Efectos de campo intenso. Frecuencias de Rabi. Desplazamiento Stark. Ionización por encima del umbral (ATI). Estados vestidos. Estados de Volkov y de Floquet. Aproximación de campo intenso. Moléculas: bond softening. Ionización aumentada.</p> <p>6. Tratamiento teórico. Bases de estados en el continuo electrónico: B-splines. Integración directa de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo. Métodos híbridos. Teoría del funcional de la densidad dependiente del tiempo (TDDFT).</p> <p>7. Espectroscopia resuelta en el tiempo. Esquemas de pump-probe con pulsos láser. Usos en femtoquímica y atofísica.</p> <p>8. Control coherente de reacciones químicas. Control del ratio entre ionización y disociación. Control óptimo.</p>		
5.5.1.4 OBSERVACIONES		
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.		
5.5.1.5 COMPETENCIAS		
5.5.1.5.1 BÁSICAS Y GENERALES		
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.		
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.		
5.5.1.5.2 TRANSVERSALES		
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.		
5.5.1.5.3 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.		
5.5.1.6 ACTIVIDADES FORMATIVAS		
ACTIVIDAD FORMATIVA	HORAS	PRESENCIALIDAD
Asistencia a clases magistrales teóricas (ya sea en red o presencial): Presentaciones orales, apoyadas con material informático para todo el grupo en las que se transmitirán los contenidos fundamentales, revisados y actualizados, elaborados por el profesorado.	34	100
Estudio autónomo individual o en grupo.	35	0
Tutorías: trabajo personal bajo la supervisión de un tutor o tutora. Se analiza y discute con el tutor los datos obtenidos.	6	100
Elaboración de una memoria con ejercicios planteados en clase.	20	0
Preparación de seminarios o tutorías.	20	0
Asistencia a seminario: en estas sesiones cada estudiante obtendrá una visión práctica y actualizada de diversas técnicas mediante la asistencia a seminarios impartidos por expertos en el área.	10	100
5.5.1.7 METODOLOGÍAS DOCENTES		
Lección magistral		
Docencia en red: Se utilizará las distintas herramientas que ofrece la plataforma moodle (http://www.uam.es/moodle). Publicación de contenidos de la asignatura, herramientas de trabajo en grupo: foros de discusión y wiki, correo electrónico.		
Tutorías individuales o en grupos reducidos.		
5.5.1.8 SISTEMAS DE EVALUACIÓN		
SISTEMA DE EVALUACIÓN	PONDERACIÓN MÍNIMA	PONDERACIÓN MÁXIMA
Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura.	0.0	0.6
Discusión en tutorías y/o seminarios sobre los ejercicios, trabajos o prácticas realizadas en la asignatura.	0.0	0.4
NIVEL 2: Bioquímica computacional		
5.5.1.1 Datos Básicos del Nivel 2		
CARÁCTER	Optativa	
ECTS NIVEL 2	5	
DESPLIEGUE TEMPORAL: Anual		
ECTS Anual 1	ECTS Anual 2	ECTS Anual 3
5		



ECTS Anual 4	ECTS Anual 5	ECTS Anual 6
LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
Sí	No	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Sí
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
No	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	
LISTADO DE ESPECIALIDADES		
No existen datos		
NO CONSTAN ELEMENTOS DE NIVEL 3		
5.5.1.2 RESULTADOS DE APRENDIZAJE		
<p>Alcanzar las competencias generales y específicas de la materia y adquirir los conocimientos teóricos y prácticos descritos en sus contenidos. Desarrollar las competencias de carácter personal, interpersonal y vinculado al desarrollo ético y responsable de la profesión.</p>		
5.5.1.3 CONTENIDOS		
<ul style="list-style-type: none"> - Programas de visualización molecular. - Uso de programas de cálculo basados en métodos de estructura electrónica. - Análisis de las superficies de energía potencial. - Optimización de la geometría molecular. - Modelización de sistemas químicos y bioquímicos en disolución. - Modelización de biomoléculas: métodos de mecánica molecular. - Modelización de reacciones enzimáticas: métodos híbridos de mecánica cuántica y mecánica molecular. - Métodos estadísticos. Cálculos de parámetros cinéticos y termodinámicos de la reacción química. 		
5.5.1.4 OBSERVACIONES		
CE25. Los estudiantes adquieren los conocimientos prácticos necesarios para llevar a cabo estudios en sistemas bioquímicos utilizando simulaciones computacionales.		
5.5.1.5 COMPETENCIAS		
5.5.1.5.1 BÁSICAS Y GENERALES		
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.		
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.		
5.5.1.5.2 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.		
5.5.1.5.3 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.		
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.		
5.5.1.6 ACTIVIDADES FORMATIVAS		
ACTIVIDAD FORMATIVA	HORAS	PRESENCIALIDAD
Asistencia a clases magistrales teóricas (ya sea en red o presencial): Presentaciones orales, apoyadas con material informático para todo el grupo en las que se transmitirán los contenidos fundamentales, revisados y actualizados, elaborados por el profesorado.	20	100
Estudio autónomo individual o en grupo.	59	0
Realización de exámenes escritos	3	100
Tutorías: trabajo personal bajo la supervisión de un tutor o tutora. Se analiza y discute con el tutor los datos obtenidos.	7	100
Clases prácticas: prácticas en aula de informática o laboratorios. Las clases en sesiones de dos horas como mínimo, incluirán una introducción teórica breve en la que el profesor o profesora expondrá los conceptos básicos y aplicaciones prácticas.	20	100
Elaboración de una memoria sobre los resultados experimentales obtenidos durante las prácticas: se valorará especialmente el espíritu crítico sobre el trabajo realizado así como la búsqueda bibliográfica realizada y el grado de conocimiento adquirido sobre ésta.	16	0
5.5.1.7 METODOLOGÍAS DOCENTES		
Lección magistral		
Docencia en red: Se utilizará las distintas herramientas que ofrece la plataforma moodle (http://www.uam.es/moodle). Publicación de contenidos de la asignatura, herramientas de trabajo en grupo: foros de discusión y wiki, correo electrónico.		
Tutorías individuales o en grupos reducidos.		
Orientación y supervisión en la preparación de informes o memorias escritas.		



Clases en aula de informática. La docencia se impartirá en un aula de informática. Las clases, en sesiones de dos 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.		
5.5.1.8 SISTEMAS DE EVALUACIÓN		
SISTEMA DE EVALUACIÓN	PONDERACIÓN MÍNIMA	PONDERACIÓN MÁXIMA
Asistencia y participación en las clases magistrales.	0.0	0.1
Realización de controles (tests) a lo largo del curso.	0.0	0.3
Realización y defensa de un informe sobre los casos prácticos planteados por la profesora o profesor en clase.	0.0	0.6
NIVEL 2: Técnicas Computacionales Avanzadas		
5.5.1.1 Datos Básicos del Nivel 2		
CARÁCTER	Optativa	
ECTS NIVEL 2	6	
DESPLIEGUE TEMPORAL: Anual		
ECTS Anual 1	ECTS Anual 2	ECTS Anual 3
	6	
ECTS Anual 4	ECTS Anual 5	ECTS Anual 6
LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
No	No	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Sí
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
No	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	
LISTADO DE ESPECIALIDADES		
No existen datos		
NO CONSTAN ELEMENTOS DE NIVEL 3		
5.5.1.2 RESULTADOS DE APRENDIZAJE		
<ul style="list-style-type: none"> Plantear o reconocer la ecuación de Schödinger de sistemas modelo en presencia de condiciones externas para plantear su resolución con medios informáticos. Saber utilizar redes de computo de altas prestaciones en Red Deslocalizada (Grid o similares). Conocer al menos una biblioteca (¿library¿) de rutinas de cálculo numérico paralelo usando algún problema como referencia (por ejemplo, sistemas magnéticos). Conocer las bases de la computación cuántica y su aplicación a Química Teórica 		
5.5.1.3 CONTENIDOS		
<ul style="list-style-type: none"> Computación en Grid Técnicas de paralelización masiva: memoria compartida y memoria distribuida Utilización de librerías matemáticas masivamente paralelas. Computación Cuántica 		
5.5.1.4 OBSERVACIONES		
5.5.1.5 COMPETENCIAS		
5.5.1.5.1 BÁSICAS Y GENERALES		
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		



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.		
5.5.1.5.2 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.		
CT09 - Capacidad de obtener, seleccionar, elaborar y procesar información proveniente de fuentes diversas con criterios objetivos, priorizándolas según su calidad y pertinencia		
CT11 - Identificar y seleccionar con rigor la metodología adecuada para formular hipótesis, definir problemas y diseñar estrategias de trabajo propias de la investigación incidiendo en el compromiso ético		
5.5.1.5.3 ESPECÍFICAS		
CE02 - Amplia y/o adquiere conocimiento de los métodos básicos de la Química Cuántica y evalúa críticamente su aplicabilidad.		
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.		
5.5.1.6 ACTIVIDADES FORMATIVAS		
ACTIVIDAD FORMATIVA	HORAS	PRESENCIALIDAD
Asistencia a clases magistrales teóricas (ya sea en red o presencial): Presentaciones orales, apoyadas con material informático para todo el grupo en las que se transmitirán los contenidos fundamentales, revisados y actualizados, elaborados por el profesorado.	30	100
Estudio autónomo individual o en grupo.	60	0
Realización de exámenes escritos	2	100
Clases prácticas: prácticas en aula de informática o laboratorios. Las clases en sesiones de dos horas como mínimo, incluirán una introducción teórica breve en la que el profesor o profesora expondrá los conceptos básicos y aplicaciones prácticas.	30	100
Elaboración de una memoria con ejercicios planteados en clase.	10	0
5.5.1.7 METODOLOGÍAS DOCENTES		
Lección magistral		
Docencia en red: Se utilizará las distintas herramientas que ofrece la plataforma moodle (http://www.uam.es/moodle). Publicación de contenidos de la asignatura, herramientas de trabajo en grupo: foros de discusión y wiki, correo electrónico.		
Clases en aula de informática. La docencia se impartirá en un aula de informática. Las clases, en sesiones de dos 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.		
5.5.1.8 SISTEMAS DE EVALUACIÓN		
SISTEMA DE EVALUACIÓN	PONDERACIÓN MÍNIMA	PONDERACIÓN MÁXIMA
Realización de controles (tests) a lo largo del curso.	0.0	0.2
Realización y defensa de un informe sobre los casos prácticos planteados por la profesora o profesor en clase.	0.0	0.8
NIVEL 2: Multiescala, Machine Learning y métodos QSAR aplicados a biomoléculas		
5.5.1.1 Datos Básicos del Nivel 2		
CARÁCTER	Optativa	



ECTS NIVEL 2		6
DESPLIEGUE TEMPORAL: Anual		
ECTS Anual 1	ECTS Anual 2	ECTS Anual 3
	6	
ECTS Anual 4	ECTS Anual 5	ECTS Anual 6
LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
No	No	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Sí
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
No	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	
LISTADO DE ESPECIALIDADES		
No existen datos		
NO CONSTAN ELEMENTOS DE NIVEL 3		
5.5.1.2 RESULTADOS DE APRENDIZAJE		
<p>El objetivo de este curso es proporcionar a los estudiantes los conocimientos básicos de técnicas de aprendizaje automático y métodos QSAR (Quantitative Structure-Activity Relationship) aplicados a sistemas moleculares de pequeño y gran tamaño, tales como reactivos simples o biomoléculas.</p> <p>El Machine Learning (ML) permite a los equipos solucionar problemas aprendiendo de los datos. En los últimos años el ML se ha aplicado, cada vez más, a una amplia variedad de desafíos químicos, desde la mejora de la química computacional hasta el diseño de medicamentos y materiales e incluso la planificación de síntesis. Este curso nace con el propósito de introducir esta realidad de rápido crecimiento.</p>		
5.5.1.3 CONTENIDOS		
<ol style="list-style-type: none"> 1. Introducción al Cloud Computing. 2. Virtualización y arquitecturas contenedoras. 3. Servicios de gestión del Big Data y despliegues automáticos. 4. Clasificación binaria de proteínas mediante enfoque del Machine learning. 5. Modelado multiescala de procesos bioquímicos. 6. Dinámica Molecular de alto rendimiento: teoría y aplicaciones. 7. Introducción al Deep learning y al Tensorflow. 8. Dinámica molecular multiescala de biomoléculas. 9. Posibilidades del Machine learning. 10. Métodos QSAR aplicados a biomoléculas. 		
5.5.1.4 OBSERVACIONES		
5.5.1.5 COMPETENCIAS		
5.5.1.5.1 BÁSICAS Y GENERALES		
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.		
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		
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.		
5.5.1.5.2 TRANSVERSALES		
CT02 - El/la estudiante es organizado en el trabajo demostrando que sabe gestionar el tiempo y los recursos de que dispone.		
CT09 - Capacidad de obtener, seleccionar, elaborar y procesar información proveniente de fuentes diversas con criterios objetivos, priorizándolas según su calidad y pertinencia		



CT10 - Predecir y controlar la evolución de situaciones complejas mediante el desarrollo de nuevas e innovadoras metodologías de trabajo adaptadas al ámbito científico/investigador y profesional		
CT11 - Identificar y seleccionar con rigor la metodología adecuada para formular hipótesis, definir problemas y diseñar estrategias de trabajo propias de la investigación incidiendo en el compromiso ético		
5.5.1.5.3 ESPECÍFICAS		
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.		
CE16 - El/la estudiante es capaz de discernir entre los diferentes métodos existentes y cómo seleccionar el más adecuado para cada problema.		
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.		
5.5.1.6 ACTIVIDADES FORMATIVAS		
ACTIVIDAD FORMATIVA	HORAS	PRESENCIALIDAD
Asistencia a clases magistrales teóricas (ya sea en red o presencial): Presentaciones orales, apoyadas con material informático para todo el grupo en las que se transmitirán los contenidos fundamentales, revisados y actualizados, elaborados por el profesorado.	30	100
Estudio autónomo individual o en grupo.	60	0
Realización de exámenes escritos	2	100
Clases prácticas: prácticas en aula de informática o laboratorios. Las clases en sesiones de dos horas como mínimo, incluirán una introducción teórica breve en la que el profesor o profesora expondrá los conceptos básicos y aplicaciones prácticas.	30	100
Elaboración de una memoria con ejercicios planteados en clase.	10	0
5.5.1.7 METODOLOGÍAS DOCENTES		
Lección magistral		
Docencia en red: Se utilizará las distintas herramientas que ofrece la plataforma moodle (http://www.uam.es/moodle). Publicación de contenidos de la asignatura, herramientas de trabajo en grupo: foros de discusión y wiki, correo electrónico.		
Clases en aula de informática. La docencia se impartirá en un aula de informática. Las clases, en sesiones de dos 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.		
5.5.1.8 SISTEMAS DE EVALUACIÓN		
SISTEMA DE EVALUACIÓN	PONDERACIÓN MÍNIMA	PONDERACIÓN MÁXIMA
Realización de controles (tests) a lo largo del curso.	0.0	0.2
Realización y defensa de un informe sobre los casos prácticos planteados por la profesora o profesor en clase.	0.0	0.8
NIVEL 2: Métodos teóricos para la simulación de materiales		
5.5.1.1 Datos Básicos del Nivel 2		
CARÁCTER	Optativa	
ECTS NIVEL 2	6	
DESPLIEGUE TEMPORAL: Anual		
ECTS Anual 1	ECTS Anual 2	ECTS Anual 3
	6	



ECTS Anual 4	ECTS Anual 5	ECTS Anual 6
LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
No	No	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Sí
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
No	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	
LISTADO DE ESPECIALIDADES		
No existen datos		
NO CONSTAN ELEMENTOS DE NIVEL 3		
5.5.1.2 RESULTADOS DE APRENDIZAJE		
<p>El curso se centrará en el uso de técnicas de química teórica para describir las propiedades de nuevos materiales. Incluirá aspectos como el modelado de sistemas periódicos, superficies, nanotubos, materiales 2D como frameworks metal-orgánicos (COF), deposito de moléculas en superficies, auto-ensamblado, etc. Este tipo de simulación se encuentra en la frontera de la física y la química y muchas veces requiere combinar diferentes métodos computacionales para describir tanto el material como la parte activa del mismo y diferentes efectos como la transferencias de electrones. El curso presentará ejemplos para mostrar cómo aplicar diferentes modelos y también incluirá aspectos como el diseño de materiales utilizando técnicas de machine learning.</p>		
5.5.1.3 CONTENIDOS		
<p>Bloque teórico</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Nanomateriales: perspectiva desde la física y la química. 2. Teoría de sólidos. 3. Diseño de materiales específicos. 4. Semiconductores orgánicos para optoelectrónica. 5. Interfases organo-inorgánicas. 6. Grafeno y materiales 2D. 7. Funcionalización del grafeno y puntos de carbono. <p>Bloque práctico</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. VASP 2. Descubriendo y diseñando materiales de alto rendimiento. 3. Mecánica molecular/ Simulación dinámica de materiales moleculares. 4. Cálculos DFT no periódicos de materiales y superficies. 		
5.5.1.4 OBSERVACIONES		
5.5.1.5 COMPETENCIAS		
5.5.1.5.1 BÁSICAS Y GENERALES		
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.		
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		
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.		
5.5.1.5.2 TRANSVERSALES		
CT02 - El/la estudiante es organizado en el trabajo demostrando que sabe gestionar el tiempo y los recursos de que dispone.		



CT04 - El/la estudiante tiene capacidad de generar nuevas ideas a partir de sus propias decisiones.		
CT09 - Capacidad de obtener, seleccionar, elaborar y procesar información proveniente de fuentes diversas con criterios objetivos, priorizándolas según su calidad y pertinencia		
CT10 - Predecir y controlar la evolución de situaciones complejas mediante el desarrollo de nuevas e innovadoras metodologías de trabajo adaptadas al ámbito científico/investigador y profesional		
CT11 - Identificar y seleccionar con rigor la metodología adecuada para formular hipótesis, definir problemas y diseñar estrategias de trabajo propias de la investigación incidiendo en el compromiso ético		
5.5.1.5.3 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 - Amplia y/o adquiere conocimiento de los métodos básicos de la Química Cuántica y evalúa críticamente su aplicabilidad.		
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.		
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.		
5.5.1.6 ACTIVIDADES FORMATIVAS		
ACTIVIDAD FORMATIVA	HORAS	PRESENCIALIDAD
Asistencia a clases magistrales teóricas (ya sea en red o presencial): Presentaciones orales, apoyadas con material informático para todo el grupo en las que se transmitirán los contenidos fundamentales, revisados y actualizados, elaborados por el profesorado.	30	100
Estudio autónomo individual o en grupo.	60	0
Realización de exámenes escritos	2	100
Clases prácticas: prácticas en aula de informática o laboratorios. Las clases en sesiones de dos horas como mínimo, incluirán una introducción teórica breve en la que el profesor o profesora expondrá los conceptos básicos y aplicaciones prácticas.	30	100
5.5.1.7 METODOLOGÍAS DOCENTES		
Lección magistral		
Docencia en red: Se utilizará las distintas herramientas que ofrece la plataforma moodle (http://www.uam.es/moodle). Publicación de contenidos de la asignatura, herramientas de trabajo en grupo: foros de discusión y wiki, correo electrónico.		
Resolución de ejercicios prácticos (problemas numéricos, cuestiones tipo test, interpretación y procesamiento de la información, evaluación de publicaciones científicas, etc.).		
Clases en aula de informática. La docencia se impartirá en un aula de informática. Las clases, en sesiones de dos 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.		
5.5.1.8 SISTEMAS DE EVALUACIÓN		
SISTEMA DE EVALUACIÓN	PONDERACIÓN MÍNIMA	PONDERACIÓN MÁXIMA
Realización de controles (tests) a lo largo del curso.	0.0	0.2
Realización y defensa de un informe sobre los casos prácticos planteados por la profesora o profesor en clase.	0.0	0.8
NIVEL 2: De la teoría a la implementación: tutoriales en química teórica		
5.5.1.1 Datos Básicos del Nivel 2		
CARÁCTER	Optativa	



ECTS NIVEL 2		6
DESPLIEGUE TEMPORAL: Anual		
ECTS Anual 1	ECTS Anual 2	ECTS Anual 3
	6	
ECTS Anual 4	ECTS Anual 5	ECTS Anual 6
LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
No	No	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Sí
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
No	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	
LISTADO DE ESPECIALIDADES		
No existen datos		
NO CONSTAN ELEMENTOS DE NIVEL 3		
5.5.1.2 RESULTADOS DE APRENDIZAJE		
<p>El objetivo de esta escuela es aprender a implementar la teoría de la química cuántica en el código informático. Por lo tanto, después de una introducción de cada tema, se dedicará mucho tiempo a codificar la teoría en tutoriales prácticos. Los temas incluyen la teoría de Hückel, la teoría de Hartree-Fock, la teoría del DFT, dinámica cuántica y molecular, y magnetismo cuántico.</p>		
5.5.1.3 CONTENIDOS		
<ol style="list-style-type: none"> 1. Teoría e implementación del método Hartree-Fock (HF). 2. Teoría e implementación de métodos basados en DFT. 3. Geometría y topología - construyendo nanopartículas. 4. Estudio de superficies de energía potencial - Dinámica molecular. 5. Magnetismo cuántico - el modelo de Heisenberg. 6. Dinámica Cuántica. 7. Estructuras de carbono de baja dimensión - la utilidad de los enfoques simples. 		
5.5.1.4 OBSERVACIONES		
5.5.1.5 COMPETENCIAS		
5.5.1.5.1 BÁSICAS Y GENERALES		
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.		
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.		
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		
5.5.1.5.2 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.		
CT05 - Capacidad de razonamiento y reflexión crítica y autocrítica como vía para mejorar el propio proceso de aprendizaje y la generación y desarrollo de ideas en un contexto profesional o de investigación.		



5.5.1.5.3 ESPECÍFICAS		
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.		
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.		
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.		
5.5.1.6 ACTIVIDADES FORMATIVAS		
ACTIVIDAD FORMATIVA	HORAS	PRESENCIALIDAD
Asistencia a clases magistrales teóricas (ya sea en red o presencial): Presentaciones orales, apoyadas con material informático para todo el grupo en las que se transmitirán los contenidos fundamentales, revisados y actualizados, elaborados por el profesorado.	30	100
Estudio autónomo individual o en grupo.	60	0
Realización de exámenes escritos	2	100
Clases prácticas: prácticas en aula de informática o laboratorios. Las clases en sesiones de dos horas como mínimo, incluirán una introducción teórica breve en la que el profesor o profesora expondrá los conceptos básicos y aplicaciones prácticas.	30	100
Elaboración de una memoria sobre los resultados experimentales obtenidos durante las prácticas: se valorará especialmente el espíritu crítico sobre el trabajo realizado así como la búsqueda bibliográfica realizada y el grado de conocimiento adquirido sobre ésta.	10	0
5.5.1.7 METODOLOGÍAS DOCENTES		
Lección magistral		
Docencia en red: Se utilizará las distintas herramientas que ofrece la plataforma moodle (http://www.uam.es/moodle). Publicación de contenidos de la asignatura, herramientas de trabajo en grupo: foros de discusión y wiki, correo electrónico.		
Presentaciones orales de temas previamente preparados, incluyendo debate con compañeros y profesores.		
Clases en aula de informática. La docencia se impartirá en un aula de informática. Las clases, en sesiones de dos 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.		
5.5.1.8 SISTEMAS DE EVALUACIÓN		
SISTEMA DE EVALUACIÓN	PONDERACIÓN MÍNIMA	PONDERACIÓN MÁXIMA
Realización de controles (tests) a lo largo del curso.	0.0	0.2
Realización y defensa de un informe sobre los casos prácticos planteados por la profesora o profesor en clase.	0.0	0.8
NIVEL 2: Proyecto de programación de química computacional		
5.5.1.1 Datos Básicos del Nivel 2		



CARÁCTER	Optativa	
ECTS NIVEL 2	6	
DESPLIEGUE TEMPORAL: Anual		
ECTS Anual 1	ECTS Anual 2	ECTS Anual 3
	6	
ECTS Anual 4	ECTS Anual 5	ECTS Anual 6
LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
No	No	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Sí
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
No	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	
LISTADO DE ESPECIALIDADES		
No existen datos		
NO CONSTAN ELEMENTOS DE NIVEL 3		
5.5.1.2 RESULTADOS DE APRENDIZAJE		
<p>El objetivo de este curso es aprender algunas técnicas básicas de programación y programación paralela, que son relevantes para muchos problemas de química computacional. Durante la clase, el estudiante aprenderá o reforzará sus conocimientos de un lenguaje de programación compilado (típicamente Fortran o C++), e implementará desde cero un programa básico (y quizás más avanzado) para simulaciones de dinámica molecular de partículas Lennard-Jones, así como desarrollar y probar una versión paralela de este código (usando OpenMP o MPI).</p>		
5.5.1.3 CONTENIDOS		
<p>Cada curso se adaptará para ofrecer un proyecto de programación en el que se exigirá unos requisitos mínimo del código que se programe como por ejemplo que el código pueda correr en paralelo. Para ello se darán nociones de Monte Carlo, Dinámica Molecular, Fortran, C, C++ y Python así como OpenMP y MPI. El estudiante decidirá cómo desarrollar su código con las herramientas que tiene y a partir de ahí tendrá un seguimiento por parte del coordinador del curso.</p>		
5.5.1.4 OBSERVACIONES		
<p>El curso esta diseñado para darse íntegramente de manera remota. El profesor dará unas clases introductorias para guiar al estudiante y a partir de ahí éstos deben ir trabajando en el proyecto asignado. Además, se concertarán sesiones individualizadas para ir comprobando el avance y para resolver las dudas que vayan surgiendo.</p>		
5.5.1.5 COMPETENCIAS		
5.5.1.5.1 BÁSICAS Y GENERALES		
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.		
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.		
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.		
5.5.1.5.2 TRANSVERSALES		



CT02 - El/la estudiante es organizado en el trabajo demostrando que sabe gestionar el tiempo y los recursos de que dispone.		
CT04 - El/la estudiante tiene capacidad de generar nuevas ideas a partir de sus propias decisiones.		
CT05 - Capacidad de razonamiento y reflexión crítica y autocrítica como vía para mejorar el propio proceso de aprendizaje y la generación y desarrollo de ideas en un contexto profesional o de investigación.		
CT11 - Identificar y seleccionar con rigor la metodología adecuada para formular hipótesis, definir problemas y diseñar estrategias de trabajo propias de la investigación incidiendo en el compromiso ético		
CT13 - Capacidad de asumir la responsabilidad del propio desarrollo profesional, de acuerdo a los retos y oportunidades que plantea la sociedad		
5.5.1.5.3 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.		
CE14 - Es capaz de desarrollar programas eficientes en Fortran con el fin de utilizar dichas herramientas en su trabajo cotidiano.		
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.		
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.		
5.5.1.6 ACTIVIDADES FORMATIVAS		
ACTIVIDAD FORMATIVA	HORAS	PRESENCIALIDAD
Asistencia a clases magistrales teóricas (ya sea en red o presencial): Presentaciones orales, apoyadas con material informático para todo el grupo en las que se transmitirán los contenidos fundamentales, revisados y actualizados, elaborados por el profesorado.	20	100
Estudio autónomo individual o en grupo.	80	0
Tutorías: trabajo personal bajo la supervisión de un tutor o tutora. Se analiza y discute con el tutor los datos obtenidos.	40	100
Elaboración de una memoria con ejercicios planteados en clase.	10	0
5.5.1.7 METODOLOGÍAS DOCENTES		
Docencia en red: Se utilizará las distintas herramientas que ofrece la plataforma moodle (http://www.uam.es/moodle). Publicación de contenidos de la asignatura, herramientas de trabajo en grupo: foros de discusión y wiki, correo electrónico.		
Tutorías individuales o en grupos reducidos.		
Orientación y supervisión en la preparación de informes o memorias escritas.		
5.5.1.8 SISTEMAS DE EVALUACIÓN		
SISTEMA DE EVALUACIÓN	PONDERACIÓN MÍNIMA	PONDERACIÓN MÁXIMA
Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura.	0.0	0.8
Discusión en tutorías y/o seminarios sobre los ejercicios, trabajos o prácticas realizadas en la asignatura.	0.0	0.2
NIVEL 2: Química de superficies e interfaces: experimentación y modelización		
5.5.1.1 Datos Básicos del Nivel 2		
CARÁCTER	Optativa	
ECTS NIVEL 2	6	
DESPLIEGUE TEMPORAL: Anual		
ECTS Anual 1	ECTS Anual 2	ECTS Anual 3



	6	
ECTS Anual 4	ECTS Anual 5	ECTS Anual 6
LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
No	No	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Sí
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
Sí	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	
LISTADO DE ESPECIALIDADES		
No existen datos		
NO CONSTAN ELEMENTOS DE NIVEL 3		
5.5.1.2 RESULTADOS DE APRENDIZAJE		
Este curso tiene por objeto adquirir un conjunto completo de conocimientos para abordar la química de las superficies de los materiales. Estará ofertado por la Universidad Sorbona de Paris quienes serán los organizadores.		
5.5.1.3 CONTENIDOS		
Este curso está organizado en torno a tres temas principales: fundamentos sobre superficies, descripciones detalladas de técnicas experimentales y teóricas de caracterización y modelización teórica de superficies, ilustradas por varias aplicaciones. Se describirán, compararán y mostrarán las herramientas experimentales y teóricas más utilizadas para la caracterización espectroscópica o microscópica de superficies (es decir, STM, AFM, LEED, XPS, ToF-SIMS, ... y DFT) en el marco de diferentes dominios de aplicación para materiales como la energía, la catálisis, los biomateriales, la corrosión, la microelectrónica, el transporte, ... Este curso tiene por objeto adquirir un conjunto completo de conocimientos para abordar la química de las superficies de los materiales		
5.5.1.4 OBSERVACIONES		
El curso se realizará en Paris, en la Universidad Sorbona, socia del máster Erasmus Mundus.		
5.5.1.5 COMPETENCIAS		
5.5.1.5.1 BÁSICAS Y GENERALES		
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.		
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.		
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.		
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		
5.5.1.5.2 TRANSVERSALES		
CT02 - El/la estudiante es organizado en el trabajo demostrando que sabe gestionar el tiempo y los recursos de que dispone.		
CT10 - Predecir y controlar la evolución de situaciones complejas mediante el desarrollo de nuevas e innovadoras metodologías de trabajo adaptadas al ámbito científico/investigador y profesional		



CT13 - Capacidad de asumir la responsabilidad del propio desarrollo profesional, de acuerdo a los retos y oportunidades que plantea la sociedad		
5.5.1.5.3 ESPECÍFICAS		
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.		
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.		
5.5.1.6 ACTIVIDADES FORMATIVAS		
ACTIVIDAD FORMATIVA	HORAS	PRESENCIALIDAD
Asistencia a clases magistrales teóricas (ya sea en red o presencial): Presentaciones orales, apoyadas con material informático para todo el grupo en las que se transmitirán los contenidos fundamentales, revisados y actualizados, elaborados por el profesorado.	30	100
Estudio autónomo individual o en grupo.	60	0
Realización de exámenes escritos	2	100
Clases prácticas: prácticas en aula de informática o laboratorios. Las clases en sesiones de dos horas como mínimo, incluirán una introducción teórica breve en la que el profesor o profesora expondrá los conceptos básicos y aplicaciones prácticas.	30	100
5.5.1.7 METODOLOGÍAS DOCENTES		
Lección magistral		
Docencia en red: Se utilizará las distintas herramientas que ofrece la plataforma moodle (http://www.uam.es/moodle). Publicación de contenidos de la asignatura, herramientas de trabajo en grupo: foros de discusión y wiki, correo electrónico.		
Clases en aula de informática. La docencia se impartirá en un aula de informática. Las clases, en sesiones de dos 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.		
5.5.1.8 SISTEMAS DE EVALUACIÓN		
SISTEMA DE EVALUACIÓN	PONDERACIÓN MÍNIMA	PONDERACIÓN MÁXIMA
Asistencia y participación en las clases magistrales.	0.0	0.1
Realización de controles (tests) a lo largo del curso.	0.0	0.2
Realización y defensa de un informe sobre los casos prácticos planteados por la profesora o profesor en clase.	0.0	0.7
NIVEL 2: Modelización multiescala de sistemas moleculares complejos		
5.5.1.1 Datos Básicos del Nivel 2		
CARÁCTER	Optativa	
ECTS NIVEL 2	6	
DESPLIEGUE TEMPORAL: Anual		
ECTS Anual 1	ECTS Anual 2	ECTS Anual 3
	6	
ECTS Anual 4	ECTS Anual 5	ECTS Anual 6
LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA



No	No	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Sí
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
Sí	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	
LISTADO DE ESPECIALIDADES		
No existen datos		
NO CONSTAN ELEMENTOS DE NIVEL 3		
5.5.1.2 RESULTADOS DE APRENDIZAJE		
Este curso se impartirá en la Universidad Sorbona de Paris, socia del Erasmus Mundus, e introducirá el estudio de, diferentes modelos desde la micro a la meso escala, para tratar sistemas biológicos complejos.		
5.5.1.3 CONTENIDOS		
<ol style="list-style-type: none"> 1. Introducción a la computación Meso-Bio-Nano (MBN). 2. Enfoque teórico para simulaciones multiescala por ordenador. 3. Modelización computacional de sistemas MBN. 4. Sistemas biomoleculares. 		
5.5.1.4 OBSERVACIONES		
Este curso se impartirá en la Universidad Sorbona de Paris, la cual es socia del Erasmus Mundus.		
5.5.1.5 COMPETENCIAS		
5.5.1.5.1 BÁSICAS Y GENERALES		
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.		
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.		
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		
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.		
5.5.1.5.2 TRANSVERSALES		
No existen datos		
5.5.1.5.3 ESPECÍFICAS		
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.		
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.		
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.		
5.5.1.6 ACTIVIDADES FORMATIVAS		
ACTIVIDAD FORMATIVA	HORAS	PRESENCIALIDAD
Asistencia a clases magistrales teóricas (ya sea en red o presencial): Presentaciones orales, apoyadas con material informático	30	100



para todo el grupo en las que se transmitirán los contenidos fundamentales, revisados y actualizados, elaborados por el profesorado.		
Estudio autónomo individual o en grupo.	60	0
Realización de exámenes escritos	2	100
Clases prácticas: prácticas en aula de informática o laboratorios. Las clases en sesiones de dos horas como mínimo, incluirán una introducción teórica breve en la que el profesor o profesora expondrá los conceptos básicos y aplicaciones prácticas.	30	100
5.5.1.7 METODOLOGÍAS DOCENTES		
Lección magistral		
Docencia en red: Se utilizará las distintas herramientas que ofrece la plataforma moodle (http://www.uam.es/moodle). Publicación de contenidos de la asignatura, herramientas de trabajo en grupo: foros de discusión y wiki, correo electrónico.		
Clases en aula de informática. La docencia se impartirá en un aula de informática. Las clases, en sesiones de dos 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.		
5.5.1.8 SISTEMAS DE EVALUACIÓN		
SISTEMA DE EVALUACIÓN	PONDERACIÓN MÍNIMA	PONDERACIÓN MÁXIMA
Asistencia y participación en las clases magistrales.	0.0	0.1
Realización de controles (tests) a lo largo del curso.	0.0	0.2
Realización y defensa de un informe sobre los casos prácticos planteados por la profesora o profesor en clase.	0.0	0.7
NIVEL 2: Modelización de estructura electrónica		
5.5.1.1 Datos Básicos del Nivel 2		
CARÁCTER	Optativa	
ECTS NIVEL 2	6	
DESPLIEGUE TEMPORAL: Anual		
ECTS Anual 1	ECTS Anual 2	ECTS Anual 3
	6	
ECTS Anual 4	ECTS Anual 5	ECTS Anual 6
LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
No	No	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Sí
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
Sí	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	
LISTADO DE ESPECIALIDADES		
No existen datos		
NO CONSTAN ELEMENTOS DE NIVEL 3		
5.5.1.2 RESULTADOS DE APRENDIZAJE		



El curso se impartirá en la Universidad Sorbona de Paris y estará centrado en los aspectos avanzados de los cálculos de la estructura electrónica.

5.5.1.3 CONTENIDOS

El objetivo principal de este curso es cubrir los métodos modernos de la teoría de la estructura electrónica "ab initio", para investigar las propiedades de la materia condensada en estado de tierra, perturbador y excitado. Esto se logrará mediante clases y ejercicios (TD), incluidos los numéricos. Empezaremos con la teoría de Fermi del electrón-gas, para desarrollar los fundamentos de la Teoría Funcional de la Densidad (DFT), el marco principal y punto de partida de los métodos modernos de estructura electrónica. Evaluaremos su extensión, sus principales aproximaciones, su desarrollo operativo y sus principales aplicaciones en la determinación de las propiedades estructurales, electrónicas y magnéticas de la materia en el estado terrestre. El objetivo principal de este curso es cubrir los métodos modernos de la teoría de la estructura electrónica "ab initio", para investigar las propiedades de la materia condensada en estado de tierra, perturbador y excitado. Esto se logrará mediante clases y ejercicios (TD), incluidos los numéricos. Empezaremos con la teoría de Fermi del electrón-gas, para desarrollar los fundamentos de la Teoría Funcional de la Densidad (DFT), el marco principal y punto de partida de los métodos modernos de estructura electrónica. Evaluaremos su extensión, sus principales aproximaciones, su desarrollo operativo y sus principales aplicaciones en la determinación de las propiedades estructurales, electrónicas y magnéticas de la materia en el estado terrestre.

5.5.1.4 OBSERVACIONES

La Universidad Sorbona será la encargada de organizar este curso. Será realizado en Paris.

5.5.1.5 COMPETENCIAS

5.5.1.5.1 BÁSICAS Y GENERALES

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.

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

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.

5.5.1.5.2 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.

CT05 - Capacidad de razonamiento y reflexión crítica y autocrítica como vía para mejorar el propio proceso de aprendizaje y la generación y desarrollo de ideas en un contexto profesional o de investigación.

CT09 - Capacidad de obtener, seleccionar, elaborar y procesar información proveniente de fuentes diversas con criterios objetivos, priorizándolas según su calidad y pertinencia

5.5.1.5.3 ESPECÍFICAS

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.

5.5.1.6 ACTIVIDADES FORMATIVAS

ACTIVIDAD FORMATIVA	HORAS	PRESENCIALIDAD
Asistencia a clases magistrales teóricas (ya sea en red o presencial): Presentaciones orales, apoyadas con material informático para todo el grupo en las que se transmitirán los contenidos fundamentales, revisados y actualizados, elaborados por el profesorado.	30	100



Estudio autónomo individual o en grupo.	60	0
Realización de exámenes escritos	2	100
Clases prácticas: prácticas en aula de informática o laboratorios. Las clases en sesiones de dos horas como mínimo, incluirán una introducción teórica breve en la que el profesor o profesora expondrá los conceptos básicos y aplicaciones prácticas.	30	100
5.5.1.7 METODOLOGÍAS DOCENTES		
Lección magistral		
Docencia en red: Se utilizará las distintas herramientas que ofrece la plataforma moodle (http://www.uam.es/moodle). Publicación de contenidos de la asignatura, herramientas de trabajo en grupo: foros de discusión y wiki, correo electrónico.		
Clases en aula de informática. La docencia se impartirá en un aula de informática. Las clases, en sesiones de dos 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.		
5.5.1.8 SISTEMAS DE EVALUACIÓN		
SISTEMA DE EVALUACIÓN	PONDERACIÓN MÍNIMA	PONDERACIÓN MÁXIMA
Asistencia y participación en las clases magistrales.	0.0	0.1
Realización de controles (tests) a lo largo del curso.	0.0	0.2
Realización y defensa de un informe sobre los casos prácticos planteados por la profesora o profesor en clase.	0.0	0.7
5.5 NIVEL 1: MÉTODOS AVANZADOS Y MODELIZACIÓN		
5.5.1 Datos Básicos del Nivel 1		
NIVEL 2: Métodos Avanzados en Estructura Electrónica, Dinámica y Modelización Molecular		
5.5.1.1 Datos Básicos del Nivel 2		
CARÁCTER	Obligatoria	
ECTS NIVEL 2	12	
DESPLIEGUE TEMPORAL: Anual		
ECTS Anual 1	ECTS Anual 2	ECTS Anual 3
	12	
ECTS Anual 4	ECTS Anual 5	ECTS Anual 6
LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
No	No	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Sí
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
No	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	
NO CONSTAN ELEMENTOS DE NIVEL 3		
5.5.1.2 RESULTADOS DE APRENDIZAJE		
<ol style="list-style-type: none"> Familiarizar a los estudiantes con las posibilidades que ofrece los métodos Coupled Cluster para el cálculo de una variedad de propiedades moleculares, que representan esencialmente la respuesta del sistema molecular a una perturbación electromagnética. Aprender las bases teóricas de los métodos, proporcionando información sobre el método de onda plana-pseudopotencial y las técnicas de Transformada Rápida de Fourier. Cálculo, utilizando métodos DFT, de propiedades moleculares de sistemas grandes, tanto para moléculas como para materiales. 		



4. Obtener una descripción teórica de la estructura electrónica que se puede utilizar para interpretar datos experimentales, predecir fenómenos interesantes y / o desarrollar nuevos conceptos teóricos.
5. Introducir la teoría de Valence Bond (VB).
6. Aprender a interpretar los resultados de diferentes cálculos de Valence Bond utilizando diferentes modelos orbitales.
7. Aprender Métodos multireferenciales.
8. Aprender a analizar la función de onda usando diferentes metodologías (AIM, ELF, NBO...).
9. Esbozar los principios básicos del enfoque del paquete de ondas dependiente del tiempo.
10. Conocer los fundamentos de la Dinámica Molecular clásica y los pasos para preparar los cálculos MD.
11. Enfoque de paquete de onda dependiente del tiempo: obtención de información de dispersión.
12. Visión general de las teorías de las velocidades de reacción: las propiedades básicas de las reacciones elementales obtenidas a partir de experimentos de cinética de reacción.
13. Conocer los métodos que combinan dinámicas clásicas con descripción cuántica de partes del sistema.
14. Conocer las técnicas que permiten acoplar el movimiento electrónico y nuclear.

5.5.1.3 CONTENIDOS

Bloque 1 - Métodos avanzados en estructura electrónica.

- Teoría del enlace de valencia.
- Correlación electrónica con métodos de función de onda multiconfiguracionales.
- Análisis de la función de ondas.
- Teoría Coupled - Cluster.

Bloque 2 - Dinámica y modelización molecular.

- Fuerzas intramoleculares.
- Dinámica molecular: fundamentos y simulación de fisisorción de gas.
- Enfoque de paquete de ondas dependiente del tiempo: obtención de información de dispersión.
- Dinámica molecular ab-initio: de la teoría a la aplicación.
- Esquemas QM/MM.

5.5.1.4 OBSERVACIONES

5.5.1.5 COMPETENCIAS

5.5.1.5.1 BÁSICAS Y GENERALES

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.

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.

5.5.1.5.2 TRANSVERSALES

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

CT07 - Saber comunicar y argumentar conocimientos, resultados y conclusiones de la investigación o práctica profesional a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades

CT11 - Identificar y seleccionar con rigor la metodología adecuada para formular hipótesis, definir problemas y diseñar estrategias de trabajo propias de la investigación incidiendo en el compromiso ético

5.5.1.5.3 ESPECÍFICAS

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

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.



5.5.1.6 ACTIVIDADES FORMATIVAS		
ACTIVIDAD FORMATIVA	HORAS	PRESENCIALIDAD
Asistencia a clases magistrales teóricas (ya sea en red o presencial): Presentaciones orales, apoyadas con material informático para todo el grupo en las que se transmitirán los contenidos fundamentales, revisados y actualizados, elaborados por el profesorado.	40	100
Estudio autónomo individual o en grupo.	65	0
Realización de exámenes escritos	2	100
Clases prácticas: prácticas en aula de informática o laboratorios. Las clases en sesiones de dos horas como mínimo, incluirán una introducción teórica breve en la que el profesor o profesora expondrá los conceptos básicos y aplicaciones prácticas.	40	100
Elaboración de una memoria con ejercicios planteados en clase.	60	0
Preparación de seminarios o tutorías.	36	0
5.5.1.7 METODOLOGÍAS DOCENTES		
Lección magistral		
Docencia en red: Se utilizará las distintas herramientas que ofrece la plataforma moodle (http://www.uam.es/moodle). Publicación de contenidos de la asignatura, herramientas de trabajo en grupo: foros de discusión y wiki, correo electrónico.		
Tutorías individuales o en grupos reducidos.		
Orientación y supervisión en la preparación de informes o memorias escritas.		
Clases en aula de informática. La docencia se impartirá en un aula de informática. Las clases, en sesiones de dos 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.		
5.5.1.8 SISTEMAS DE EVALUACIÓN		
SISTEMA DE EVALUACIÓN	PONDERACIÓN MÍNIMA	PONDERACIÓN MÁXIMA
Realización de controles (tests) a lo largo del curso.	0.0	0.2
Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura.	0.0	0.8
5.5 NIVEL 1: TRABAJO FIN DE MÁSTER		
5.5.1 Datos Básicos del Nivel 1		
NIVEL 2: Trabajo fin de máster		
5.5.1.1 Datos Básicos del Nivel 2		
CARÁCTER	Trabajo Fin de Grado / Máster	
ECTS NIVEL 2	30	
DESPLIEGUE TEMPORAL: Anual		
ECTS Anual 1	ECTS Anual 2	ECTS Anual 3
	30	
ECTS Anual 4	ECTS Anual 5	ECTS Anual 6
LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
Sí	No	No



GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Sí
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
No	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	
LISTADO DE ESPECIALIDADES		
No existen datos		
NO CONSTAN ELEMENTOS DE NIVEL 3		
5.5.1.2 RESULTADOS DE APRENDIZAJE		
<p>Alcanzar las competencias generales y específicas de la materia y adquirir los conocimientos teóricos y prácticos descritos en sus contenidos. Desarrollar las competencias de carácter personal, interpersonal y vinculado al desarrollo ético y responsable de la profesión.</p>		
5.5.1.3 CONTENIDOS		
Diseño, planificación y desarrollo de un proyecto de investigación original.		
5.5.1.4 OBSERVACIONES		
<p>Las competencias específicas entre CE23-CE28, inclusive, están asociadas al módulo optativo. Ellas son:</p> <p>CE23. Los estudiantes tiene conocimientos tanto a nivel de usuario como de administrador de sistema 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.</p> <p>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.</p> <p>CE25. Los estudiantes adquieren los conocimientos prácticos necesarios para llevar a cabo estudios en sistemas bioquímicos utilizando simulaciones computacionales.</p> <p>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.</p> <p>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.</p> <p>CE28. Proporcionar la metodología básica para el tratamiento de sistemas periódicos, cristales y polímeros.</p>		
5.5.1.5 COMPETENCIAS		
5.5.1.5.1 BÁSICAS Y GENERALES		
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.		
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.		
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.
5.5.1.5.2 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.
CT08 - Decidir y utilizar los procedimientos adecuados para conseguir financiación como investigador/a o como emprendedor/a
CT09 - Capacidad de obtener, seleccionar, elaborar y procesar información proveniente de fuentes diversas con criterios objetivos, priorizándolas según su calidad y pertinencia
CT11 - Identificar y seleccionar con rigor la metodología adecuada para formular hipótesis, definir problemas y diseñar estrategias de trabajo propias de la investigación incidiendo en el compromiso ético
CT13 - Capacidad de asumir la responsabilidad del propio desarrollo profesional, de acuerdo a los retos y oportunidades que plantea la sociedad
5.5.1.5.3 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 - Amplia 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.
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 cuánticas 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.		
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.		
5.5.1.6 ACTIVIDADES FORMATIVAS		
ACTIVIDAD FORMATIVA	HORAS	PRESENCIALIDAD
Búsqueda bibliográfica y análisis de trabajos de investigación relacionados.	10	0
Posibilidad de estancia en una de las 32 universidades europeas, y de fuera de europa, para la realización de parte de su trabajo de fin de máster. La estancia también se podrá realizar en uno de los centros de supercomputación asociados así como en una de las empresas participantes.	230	100
Elaboración de una memoria con los resultados del trabajo de fin de Máster y preparación de la presentación.	60	0
Estudio autónomo individual o en grupo.	380	0
Tutorías: trabajo personal bajo la supervisión de un tutor o tutora. Se analiza y discute con el tutor los datos obtenidos.	20	100
Exposición pública de trabajos por parte del estudiantado: individualmente o en grupo expondrán un trabajo relativo a temas actuales relacionados con la asignatura. Los estudiantes elaborarán un pequeño informe escrito y presentado/ defendido en clase ante la profesora o profesor y el resto de estudiantes. Se valorará especialmente el espíritu crítico.	4	100
Asistencia a seminario: en estas sesiones cada estudiante obtendrá una visión práctica y actualizada de diversas técnicas mediante la asistencia a seminarios impartidos por expertos en el área.	46	100
5.5.1.7 METODOLOGÍAS DOCENTES		
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.		
5.5.1.8 SISTEMAS DE EVALUACIÓN		
SISTEMA DE EVALUACIÓN	PONDERACIÓN MÍNIMA	PONDERACIÓN MÁXIMA
Realización y defensa pública y oral ante un tribunal evaluador del informe escrito sobre el trabajo de investigación original realizado por el estudiante.	0.0	1.0



6. PERSONAL ACADÉMICO

6.1 PROFESORADO Y OTROS RECURSOS HUMANOS				
Universidad	Categoría	Total %	Doctores %	Horas %
Universidad de Extremadura	Otro personal docente con contrato laboral	.9	100	10
Universidad de Extremadura	Profesor Contratado Doctor	1.8	100	10
Universidad de Extremadura	Profesor Titular de Universidad	1.8	100	10
Universidad de Barcelona	Profesor Asociado (incluye profesor asociado de C.C.: de Salud)	.9	100	10
Universidad de Barcelona	Profesor Titular de Universidad	10.1	100	10
Universidad Jaume I de Castellón	Otro personal docente con contrato laboral	.9	100	10
Universidad Autónoma de Madrid	Profesor Titular de Universidad	.9	100	10
Universidad de Murcia	Catedrático de Universidad	2.8	100	10
Universidad de Oviedo	Catedrático de Universidad	2.8	100	10
Universitat de València (Estudi General)	Profesor Titular de Universidad	3.7	100	10
Universidad de Cantabria	Catedrático de Universidad	2.8	100	10
Universidad de Cantabria	Profesor Titular de Universidad	.9	100	10
Universidad de Salamanca	Catedrático de Universidad	.9	100	10
Universidad de Salamanca	Ayudante Doctor	1.8	100	10
Universidad de Salamanca	Profesor Contratado Doctor	.9	100	10
Universidad de Vigo	Catedrático de Universidad	1.8	100	10
Universidad de Vigo	Profesor Titular de Universidad	5.5	100	10
Universidad de Vigo	Profesor Contratado Doctor	.9	100	10
Universitat de les Illes Balears	Catedrático de Universidad	2.8	100	10
Universitat de les Illes Balears	Profesor Titular de Universidad	.9	100	10
Universidad de Santiago de Compostela	Catedrático de Universidad	.9	100	10



Universidad de Santiago de Compostela	Profesor Titular de Universidad	5.5	100	10
Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea	Catedrático de Universidad	.9	100	10
Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea	Profesor Titular de Universidad	.9	100	10
Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea	Otro personal docente con contrato laboral	.9	100	10
Universidad de Valladolid	Catedrático de Universidad	1.8	100	10
Universidad de Valladolid	Profesor Titular de Universidad	1.8	100	10
Universitat de València (Estudi General)	Catedrático de Universidad	5.5	100	10
Universidad de Oviedo	Profesor Titular de Universidad	8.2	100	10
Universidad Autónoma de Madrid	Catedrático de Universidad	6.4	100	10
Universidad Jaume I de Castellón	Catedrático de Universidad	2.8	100	10
Universidad de Barcelona	Catedrático de Universidad	10.1	100	10
Universidad de Barcelona	Profesor Contratado Doctor	7.3	100	10
Universidad de Extremadura	Catedrático de Universidad	.9	100	10
PERSONAL ACADÉMICO				
Ver Apartado 6: Anexo 1.				
6.2 OTROS RECURSOS HUMANOS				
Ver Apartado 6: Anexo 2.				

7. RECURSOS MATERIALES Y SERVICIOS

Justificación de que los medios materiales disponibles son adecuados: Ver Apartado 7: Anexo 1.

8. RESULTADOS PREVISTOS

8.1 ESTIMACIÓN DE VALORES CUANTITATIVOS		
TASA DE GRADUACIÓN %	TASA DE ABANDONO %	TASA DE EFICIENCIA %
90	10	95
CODIGO	TASA	VALOR %
No existen datos		
Justificación de los Indicadores Propuestos:		
Ver Apartado 8: Anexo 1.		
8.2 PROCEDIMIENTO GENERAL PARA VALORAR EL PROCESO Y LOS RESULTADOS		
<p>Las Universidades participantes aceptan seguir un sistema de Garantía de Calidad, siempre que no haya incompatibilidad con los sistemas implementados en la propia Universidad participante, se seguirá el Sistema de Garantía Interna de Calidad (SGIC) de la Facultad de Ciencias de la Universidad Autónoma de Madrid cuyo enlace se indica en el apartado 9.</p> <p>La Facultad de Ciencias de la Universidad Autónoma de Madrid dentro del marco del sistema interno de aseguramiento de la garantía de calidad de las titulaciones, tiene establecido el proceso de análisis y evaluación de los resultados de aprendizaje a través de los siguientes procedimientos:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Revisión del Cumplimiento de los Objetivos de Aprendizaje de los Estudiantes (Nota personal es la ficha E2-F2) 		



1.1. Objeto

Resultados del programa formativo en relación al cumplimiento de los objetivos y estándares fijados para el aprendizaje, medidos a través de los indicadores correspondientes.

1.2. Alcance

Este procedimiento será de aplicación en la revisión del cumplimiento de los objetivos contemplados en el programa formativo. Su ámbito de aplicación corresponde a los planes de estudios de los títulos impartidos por la Facultad de Ciencias, y a todos los grupos de interés vinculados a los mismos.

1.3. Responsabilidades

Los responsables que intervienen en dicho procedimiento son los siguientes:

- La Universidad y/u Oficina encargada, junto con Tecnologías de la Información: se responsabilizan de poner a disposición de las titulaciones la información correspondiente a los indicadores que permiten el seguimiento del cumplimiento de los objetivos de aprendizaje del programa formativo, que son objeto de análisis en este procedimiento.
- La Facultad, mediante la dirección y supervisión del Administrador/a Gerente y del Decano, se encargarán de alimentar las bases de datos con la información de gestión académica (matrícula; actas; etc.).
- El Decano o el Coordinador de Calidad, dispondrá, en las fechas en que se establezca, de la información sobre los indicadores de aprendizaje a través de la Oficina de Análisis y Prospectiva (OAP) o el Data Warehouse (DWH).
- La Comisión de Garantía de Calidad (CGC) establece las fechas de referencia para la extracción de los datos relacionados con el cumplimiento de los objetivos de aprendizaje .

1.4. Descripción del Procedimiento

El presente procedimiento recoge las siguientes actividades desarrolladas para la revisión del cumplimiento de los objetivos de aprendizaje de los estudiantes:

1.4.1 La Universidad garantiza la disponibilidad de los medios necesarios para que se realice el cálculo de las tasas relativas a la consecución de los objetivos de aprendizaje del programa formativo.

1.4.2 La Oficina de Análisis y Prospectiva define la forma de cálculo de los indicadores e información necesaria y la envía al responsable técnico del Sistema DataWarehouse (DWH).

1.4.3 Desde la Facultad (secretarías de Departamento; profesores; secretaria de la Facultad, etc., según corresponda) se introducen los datos que alimentan las bases de datos institucionales vinculadas a través del Sistema DWH (matrícula; actas; etc.).

1.4.4 El Decano o el Coordinador de Calidad obtiene los datos elaborados pertinentes a través de la Oficina de Análisis y Prospectiva (OAP) y el Data Warehouse (DWH), en la fecha de referencia establecida por la CGC.

1.5. Indicadores de seguimiento, control y evaluación

- Resultados de los estudiantes. Relación entre créditos matriculados y créditos superados por asignatura y titulación
- Encuesta de satisfacción de los estudiantes, referida a una valoración global del funcionamiento de la titulación
- Encuesta de opinión de los estudiantes sobre la actividad docente
- Índice de abandono en primer año. Tasas y causas
- Índice de adquisición de competencias (anual/titulación completa)
- Tasa de eficiencia
- Tasa de graduación
- Tasa de graduación de estudiantes a tiempo completo
- Número de alumnos que tardan n años en graduarse
- Duración media de los estudios
- Tasa de abandono (interrupción de estudios)

2. Especificación del modo en el cual se utilizará la información sobre los resultados de aprendizaje en la revisión y mejora del desarrollo del plan de estudios (Nota personal es la ficha E2-F3)

2.1. Objeto

Usos que se dará a la información sobre los resultados del aprendizaje, recogida siguiendo el procedimiento descrito anteriormente, de modo que se compruebe y mejore su contribución al logro de los objetivos del plan de estudios.

2.2. Alcance

Contempla:

- La especificación del modo en el cual se analizará la información recogida siguiendo el procedimiento descrito anteriormente.
- La especificación del modo en el cual se adoptarán acciones de mejora derivadas del análisis anterior. Su ámbito de aplicación corresponde a los planes de estudios de los títulos impartidos por la Facultad de Ciencias y a todo el personal docente y de apoyo vinculado a los mismos.

2.3. Responsabilidades

- El Decano: se responsabiliza del cumplimiento de este procedimiento.



- Coordinador del título: solicita al Decano o al Coordinador de Calidad la información necesaria para el análisis y valoración de los indicadores de resultados de aprendizaje.
- Comisión docente del título: se responsabiliza de analizar la información relativa a los resultados del aprendizaje y proponer de forma conjunta a la Comisión de Garantía de Calidad y a aquellas Comisiones de Junta de Facultad implicadas, las oportunas acciones de mejora, así como de desarrollar las acciones de mejora que sean de su competencia.
- La Comisión de Garantía de Calidad propone a la Junta de Facultad el diseño y ejecución del plan de acciones de mejora de los resultados del aprendizaje en relación con el plan de estudios.
- La Junta de Facultad: se responsabiliza de aprobar, si procede, la puesta en práctica del citado "plan de acciones de mejora de los resultados del aprendizaje".
- El Coordinador de Calidad: se responsabiliza de la coordinación y seguimiento del plan de acciones de mejora de los resultados del aprendizaje.

2.4. Descripción del Procedimiento

2.4.1 El Coordinador del título solicita al Decano o al Coordinador de Calidad la información necesaria para el análisis y valoración de los indicadores de resultados de aprendizaje.

2.4.2 La Comisión docente del título:

- Recibe la información relativa a los resultados del aprendizaje de los estudiantes.
- Lleva a cabo el análisis de los indicadores en relación con el cumplimiento de los objetivos sobre resultados de aprendizaje de los estudiantes.
- Elabora un plan de mejora que aborde los problemas detectados, y lo eleva a la Comisión de Garantía de Calidad y a las Comisiones de Junta de Facultad implicadas en dicho plan de mejora.

2.4.3 La Comisión de Garantía de Calidad:

- Recibe las propuestas de mejora de la Comisión docente del título.
- Recibe el informe de viabilidad de las Comisiones de Junta de Facultad implicadas.
- Evalúa dichas propuestas, y, junto con las suyas propias, elabora una propuesta de acciones de mejora.
- Eleva dicho plan a la Junta de Facultad.

2.4.4 La Junta de Facultad:

- Da su aprobación, si procede, a las acciones de mejora.
- Si lo considerase pertinente, solicita perfeccionamientos de las propuestas a la Comisión docente del título o a la Comisión de Garantía de Calidad .

2.4.5 El Coordinador de Calidad, una vez aprobado dicho plan, coordina y supervisa la ejecución de las acciones allí contenidas, y elabora un informe sobre su desarrollo que presenta a la CGC y, posteriormente, a la Junta de Facultad.

2.5. Indicadores de seguimiento, control y evaluación

- Base de datos
- Acta de la reunión de la Comisión docente del título
- Propuestas de mejora a la Comisión de Garantía de Calidad
- Acta de la Comisión de Garantía de Calidad de su reunión en la que se eleve a la Junta de Facultad el plan de acciones de mejora, considerando las propuestas realizadas por la Comisión docente del título
- Acta de la Junta de Facultad en la que se apruebe el plan de acciones de mejora (o se soliciten perfeccionamientos a la Comisión docente del título o a la Comisión de Garantía de Calidad)
- Informes periódicos del Coordinador de Calidad relativos al grado de ejecución del plan de acciones de mejora

9. SISTEMA DE GARANTÍA DE CALIDAD

ENLACE	http://www.uam.es/ss/Satellite/Ciencias/es/1241103195217/listado/Manual_y_Registro_del_SGIC.htm
--------	---

10. CALENDARIO DE IMPLANTACIÓN

10.1 CRONOGRAMA DE IMPLANTACIÓN

CURSO DE INICIO	2013
-----------------	------

Ver Apartado 10: Anexo 1.

10.2 PROCEDIMIENTO DE ADAPTACIÓN

Se han realizado pequeños cambios al programa de "Máster Universitario en Química Teórica y Modelización Computacional" creado por el Decreto 1393/2007, del 29 de octubre y con verificación abreviada al RD 861/2010 del 2 de julio, para generar la estructura propuesta en este documento. Como se puede observar en la Tabla de Adaptación de Asignaturas del anexo 5, las modificaciones se plantean en el primer año, al que hemos llamado M1 (módulos del 1 al 4 de la estructura actual).

Las modificaciones hechas al programa se detallan a continuación:

- Todas las asignaturas pasan a ser de 5 ECTS
- "Fundamentos Matemáticos de la Química Teórica" cambia ligeramente su nombre por "Fundamentos Matemáticos de la Mecánica Cuántica".
- Los contenidos impartidos en la asignatura "Métodos de la Química Cuántica y la Mecánica Estadística" (de 10 ECTS) se separan para crear "Mecánica Estadística y aplicaciones en simulación" y "Métodos de la Química Teórica I" de 5 ECTS cada una.



- "Mecánica Estadística y aplicaciones en simulación" introduce los siguientes nuevos contenidos: Métodos Monte Carlo, Cálculo de propiedades termodinámicas y estructurales, Aspectos prácticos de la simulación por ordenador.
- "Métodos de la Química Teórica I" introduce los siguientes nuevos contenidos: Visión general de métodos no perturbacionales basados en función de onda. Se cita de forma muy general: Teoría del funcional de la Densidad Dependiente del Tiempo, TDDFT-Respuesta lineal. TDDF-Solución global.
- De la asignatura "Técnicas Computacionales y Cálculo Numérico" se elimina las nociones de paralelización.
- "Simetría en átomos, moléculas y sólidos y Mecánica Cuántica" de 9 ECTS se convierte en " Simetría en átomos, moléculas y sólidos" y "Métodos de la Química Teórica II" de 5 ECTS cada una.
- "Métodos de la Química Teórica II" se crea recogiendo contenidos de las actuales "Métodos de la Química Cuántica y la Mecánica estadística" y "Simetría en átomos, moléculas y sólidos y Mecánica Cuántica", con los contenidos que se observan en su ficha.
- Se ofertan 8 optativas comunes a todas las universidades, flexibilizando su forma de impartición.
- Se eliminan optativas como: Métodos Avanzados de la Química Cuántica, Modelización de procesos de interés en Química de la Atmósfera y Astroquímica, Teoría del Caos: Fundamentos y aplicaciones, Efectos relativistas y potenciales efectivos de Core. Por tener poca acogida en ediciones anteriores. Y se crean nuevas optativas como: Profundización en los métodos de la Química Teórica, Laboratorio de Química Teórica Aplicada y Bioquímica Computacional.
- "Profundización en los métodos de la Química Teórica", nueva optativa cuyo objetivo es tratar con mayor profundidad temas tales como desarrollos, problemas de los métodos, etc.
- La asignatura "Dinámica de las Reacciones Químicas" introduce en sus contenidos: Dinámica en estados excitados.
- "Formación en Unix y Unix de gestión" cambia su nombre a "Linux y Linux de gestión", mejor adaptado a sus contenidos.
- "Laboratorio de Química Teórica Aplicada" nueva optativa cuyo objetivo es enseñarle a los estudiantes a manejar los programas básicos que se utilizan en cada grupo.
- Bioquímica Computacional: nueva optativa cuyo objetivo es lograr que el estudiante adquiera los conocimientos prácticos necesarios para llevar a cabo estudios en sistemas biológicos utilizando simulación computacional.
- "Técnicas Computacionales Avanzadas" incluirá en sus contenidos un curso en paralelización masiva impartido desde Barcelona Supercomputing Center.

Como se proyecta implantar la nueva programación curricular durante el curso 2013-2014, los estudiantes que han ingresado en el curso 2012-2013 no requieren un fuerte proceso de adaptación ya que para el curso de implantación estarán realizando el M2, año que no sufre modificaciones. Por lo tanto, esperamos poner en práctica los dos cursos en el ciclo 2013-2014.

10.3 ENSEÑANZAS QUE SE EXTINGUEN

CÓDIGO	ESTUDIO - CENTRO
3001793-28027606	Máster Universitario en Química Teórica y Modelización Computacional-Universidad Autónoma de Madrid
4311360-28027060	Máster Universitario en Química Teórica y Modelización Computacional -Facultad de Ciencias
3001627-30008285	Máster Universitario en química teórica y modelización computacional-Universidad de Murcia
3001634-33019971	Máster Universitario en Química Teórica y Modelización Computacional-Universidad de Oviedo

11. PERSONAS ASOCIADAS A LA SOLICITUD

11.1 RESPONSABLE DEL TÍTULO

NOMBRE	PRIMER APELLIDO	SEGUNDO APELLIDO	
José María	Carrascosa	Baeza	
DOMICILIO	CÓDIGO POSTAL	PROVINCIA	MUNICIPIO
C/ Francisco Tomás y Valiente 7, Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid	28049	Madrid	Madrid
EMAIL	MÓVIL	FAX	CARGO
decano.ciencias@uam.es	676703649	914974374	Decano de la Facultad de Ciencias de la Universidad Autónoma de Madrid

11.2 REPRESENTANTE LEGAL



NOMBRE	PRIMER APELLIDO	SEGUNDO APELLIDO	
JUAN ANTONIO	HUERTAS	MARTINEZ	
DOMICILIO	CÓDIGO POSTAL	PROVINCIA	MUNICIPIO
C/ Einstein, 1. Edificio Rectorado. Ciudad Universitaria de Cantoblanco	28049	Madrid	Madrid
EMAIL	MÓVIL	FAX	CARGO
juanantonio.huertas@uam.es	638090858	914973970	Vicerrector de Docencia, Innovación Educativa y Calidad
El Rector de la Universidad no es el Representante Legal			
Ver Apartado 11: Anexo 1.			
11.3 SOLICITANTE			
El responsable del título no es el solicitante			
NOMBRE	PRIMER APELLIDO	SEGUNDO APELLIDO	
Manuel	Alcami	Pertejo	
DOMICILIO	CÓDIGO POSTAL	PROVINCIA	MUNICIPIO
Departamento de Química. Modulo 13. Facultad de Ciencias. Campus de Cantoblanco.	28049	Madrid	Madrid
EMAIL	MÓVIL	FAX	CARGO
manuel.alcami@uam.es	645837640	914975238	Catedrático de Química Física. Universidad Autónoma de Madrid



Apartado 1: Anexo 1

Nombre :convenio QTMC_byn-BAJA.pdf

HASH SHA1 :4D74299EB337366D50DA8DBE48F0E6C721C47D6F

Código CSV :99885372077399977689619

Ver Fichero: convenio QTMC_byn-BAJA.pdf



Apartado 2: Anexo 1

Nombre :solicitud.pdf

HASH SHA1 :AF2A0D2883384DDE3DD4FF33E37C3BCD989CCF32

Código CSV :407967049421769133065182

Ver Fichero: solicitud.pdf



Apartado 4: Anexo 1

Nombre :4infoprevia.pdf

HASH SHA1 :01AFB787C6E227C8D050DBDB794193A716FDA7F6

Código CSV :408231875326342096854448

Ver Fichero: 4infoprevia.pdf



Apartado 5: Anexo 1

Nombre :punto5modificado.pdf

HASH SHA1 :1A25E6A4BD8640D64A0AD2959BB8C78F78144926

Código CSV :408203316226538288530234

Ver Fichero: punto5modificado.pdf



Apartado 6: Anexo 1

Nombre :Personal Académico.pdf

HASH SHA1 :957EF34F8A424A2452E5FDBF9A202C76522D41B2

Código CSV :96929572117078847325956

Ver Fichero: Personal Académico.pdf



Apartado 6: Anexo 2

Nombre :Otro Recurso Humano.pdf

HASH SHA1 :2F4E473D391CAA1F22AB854A0F63D243255778D9

Código CSV :96929597270441639376750

Ver Fichero: Otro Recurso Humano.pdf



Apartado 7: Anexo 1

Nombre :Recursos Materiales y Servicios.pdf

HASH SHA1 :26D969DA90A75A973C3DF7465708B0FFDFA553C2

Código CSV :103667808772858149052007

Ver Fichero: Recursos Materiales y Servicios.pdf



Apartado 8: Anexo 1

Nombre :Justificación de Indicadores.pdf

HASH SHA1 :0438523436BA47F1BC1DBFDAEE69B8150E9A22DB

Código CSV :96929622486465903667537

Ver Fichero: Justificación de Indicadores.pdf



Apartado 10: Anexo 1

Nombre :10.pdf

HASH SHA1 :0F69BA76FA8064D7CE3A081DFA08F5F5F4359C41

Código CSV :408203846924006497443063

Ver Fichero: 10.pdf



Apartado 11: Anexo 1

Nombre :Delegacion Firma2019.pdf

HASH SHA1 :CC99FDDC346E2CC41FA1E3021B79D3E0BED98265

Código CSV :408203099701016209312726

Ver Fichero: Delegacion Firma2019.pdf



