

5. PLANIFICACIÓN DE LAS ENSEÑANZAS

5.1 DESCRIPCIÓN DEL PLAN DE ESTUDIOS

5.1.1 Estructura de las enseñanzas. Explicación general de la planificación del plan de estudios

El Máster Universitario en Química Teórica y Modelización Computacional tiene una estructura global que fue aprobada por la Comisión de la Universidad Autónoma de Madrid y por las demás Universidades del Consorcio.

En resumen se puede decir que: el Máster consta en su totalidad de 120 créditos ECTS, distribuidos en dos cursos llamados M1 y M2 (60+60). Está estructurado en 6 módulos (Módulo 1. Fundamentos; módulo 2. Métodos; módulo 3. Optatividad; módulo 4. Aspectos avanzados; módulo 5. Modelización avanzada y aplicaciones; y módulo 6. Trabajo de Fin de Máster) dentro de un perfil investigador.

La distribución de créditos, en obligatorios u optativos, del programa de máster, se puede ver en la Tabla 1.

Tabla 1. Resumen de los módulos que constituyen la propuesta del título de máster y su distribución en créditos.

<i>TIPO DE MODULO</i>	<i>ECTS</i>
<i>Obligatoria</i>	65
<i>Optativa</i>	25
<i>Trabajo fin de Máster</i>	30
<i>Total</i>	120

Las competencias específicas y su código, asociadas al módulo optativo son las siguientes:

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.

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

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

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

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

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

El cronograma previsto para el Máster Interuniversitario se esquematiza en la Tabla 2.

Tabla 2. Organización temporal del plan de estudio.

PRIMER AÑO (M1)			
Módulo 1. Fundamentos (20 ECTS)	ECTS	Módulo 3. Optatividad (25 ECTS)	ECTS
Lengua Europea	5.0	Profundización en los métodos de la Química Teórica	5.0
Fundamentos Matemáticos de la Mecánica Cuántica	5.0	Dinámica de las Reacciones Químicas	5.0
Mecánica Estadística y aplicaciones en simulación	5.0	Estados Excitados	5.0
Simetría en átomos, moléculas y sólidos	5.0	Sólidos	5.0
Módulo 2. Métodos (15 ECTS)		Linux y Linux de gestión	5.0
Técnicas Computacionales y Cálculo Numérico	5.0	Laboratorio de Química Teórica Aplicada	5.0
Métodos de la Química Teórica I	5.0	Láseres	5.0
Métodos de la Química Teórica II	5.0	Bioquímica Computacional	5.0
SEGUNDO AÑO (M2)			
Módulo 4. Aspectos avanzados (15 ECTS)	ECTS	Módulo 6. Trabajo de Fin de Máster (30 ECTS)	ECTS
Teoría Avanzada de la Estructura Electrónica y de la Materia Condensada	9.0	Trabajo Fin de Máster	30.0
Técnicas Computacionales Avanzadas	6.0		
Módulo 5. Modelización avanzada y aplicaciones (15 ECTS)			
Dinámica Química y Molecular y Simulación y Modelización por Ordenador	9.0		
Aplicaciones	6.0		

En el primer año (M1), 5 ECTS se destinarán a mejorar el conocimiento en una de lengua europea, distinta de la vernácula. Los restantes 55 ECTS se destinan a asignaturas obligatorias y optativas (ver Tabla 2) que se impartirán de diferentes maneras. En todas las asignaturas las clases del curso se impartirán en castellano o en inglés. La norma es que, en el momento en el que una asignatura tenga un estudiante de

habla no hispana matriculado, la asignatura se impartirá en inglés. El idioma en el que cada estudiante desarrolle su evaluación es de libre elección (español o inglés).

1. Las asignaturas denominadas: Fundamentos matemáticos de la mecánica cuántica; Mecánica estadística y aplicaciones en simulación; Simetría en átomos moléculas y sólidos; Técnica computacionales y cálculo numérico y Métodos de la química teórica I se darán entre los meses de septiembre a diciembre y finalizarán en el curso intensivo. Siempre que a nivel local no se imparta, las asignaturas podrán ser seguidas por los estudiantes a través del aula virtual. Antes del curso intensivo los estudiantes deben tener visto gran parte de la asignatura así como desarrollados y evaluados ejercicios y programas que se planifiquen en cada asignatura.

2. Curso Intensivo: Los Módulos 1 (salvo Lengua Europea), 2 y parte del 3 (salvo las optativas propias de cada Universidad) se desarrollan en un curso intensivo de 1 mes de duración de clases teóricas y prácticas, que se imparte de manera rotatoria en una de las 14 Universidades firmantes del convenio. Siempre que no ocurran imprevistos se realiza a finales de enero y principios de febrero. Este curso es seguido por trabajos tutelados que desarrolla cada estudiante en su Universidad a lo largo del año bajo la supervisión de un tutor y es enviado para revisión al respectivo profesor o profesora para evaluación.

3. La oferta de optativas está abierta a todos los estudiantes del programa. Las optativas son de carácter anual y se impartirán a nivel local, en el curso intensivo, en el ZCAM, o por videoconferencia, dependiendo de la optativa seleccionada. Optativas tales como: profundización en los métodos de la química teórica, dinámica de las reacciones químicas, estados excitados y sólidos, empezarán a impartirse en el curso intensivo y su estudio finalizará a través del aula virtual (como es el caso de la asignatura "profundización en los métodos de la química teórica"), o en el curso denominado ZCAM. Optativas tales como: linux y linux de gestión, láseres y bioquímica computacional se impartirán mediante videoconferencias por profesores de universidades del consorcio. Finalmente, la optativa "laboratorio de química teórica aplicada" se impartirá localmente. Los trabajos derivados del curso serán desarrollados y enviados por la mejor vía al respectivo profesor o profesora.

4. Curso ZCAM: En Zaragoza se ha fundado el Zaragoza Scientific Centre for Advanced Modelling (ZCAM) por un convenio entre el Ministerio de Ciencia e Innovación, la Fundación Aragonesa para la Investigación y el Desarrollo y la Universidad de Zaragoza. Este centro está situado en el Campus Rio Ebro y es un nodo del Centro Europeo de Cálculo Atómico y Molecular (CECAM) —existen siete en Europa— cuyo objetivo es facilitar el desarrollo de la investigación en ciencias computacionales aplicadas a simulaciones basadas en modelos atómicos para predecir propiedades físicas y comprender su comportamiento. Para llevar a cabo este objetivo, el ZCAM puede financiar workshops, miniworkshops, tutoriales y conferencias así como ayudar en la solicitud de proyectos de investigación a nivel nacional e internacional. Parte de las asignaturas optativas se podrán dar en un curso intensivo organizado por el máster en colaboración con el ZCAM. El curso es impartido en inglés por especialistas del campo y están abiertos a estudiantes externos al máster. Regularmente se desarrolla durante los meses de Mayo y Junio (1 semana por asignatura). Estos cursos tienen una componente computacional muy importante, de hecho, la mañana se dedica a clases de teoría y las tardes a clases prácticas. Estos cursos

son un complemento de gran valor al curso intensivo de un mes que se realiza en el M1 y se mantendrán siempre que los acuerdos con el CECAM sigan activos y se aprueben en la convocatoria anual de ZCAM/CECAM.

5. La asignatura “Lengua Europea” puede ser impartida en cada Universidad o convalidada con estudios hechos fuera de la Universidad en sitios reconocidos tales como: Escuelas Oficiales, Escuelas o Servicio de Idiomas de cada Universidad, centros institucionales tipo Instituto Cervantes, British Council, Leopardi, etc. También pueden admitirse evaluaciones reconocidas internacionalmente (tipo TOEFL). Cualquiera de estos certificados serán convalidables siempre que hayan sido obtenidos posterior a la inscripción en el máster y acrediten cambio de nivel. La ficha de esta asignatura se ha hecho a modo de ejemplo con la información del curso “DEVELOPING FLUENCY IN CONVERSATION AND WRITING” ofrecida por el servicio de idiomas de la Universidad Autónoma de Madrid.

El primer año del máster, M1, tiene carácter nacional. El segundo año, M2, es de carácter internacional. Las 14 universidades que presentan esta verificación, forman parte de un consorcio más amplio de 46 Universidades Europeas que firmaron en 2004 un acuerdo de cooperación (ver anexo al final del apartado "Recursos Materiales y Servicios") aún vigente para el desarrollo de enseñanzas conjuntas de máster en "Theoretical Chemistry and Computational Modelling" (artículo 1 del anexo) y en particular de un curso intensivo común "Advanced aspects and Applications in Theoretical Chemistry and Computational Modelling" (artículo 2 del anexo).

Ese curso es precisamente el curso internacional intensivo de cuatro semanas, 30 créditos, que los estudiantes de todas las Universidades deberán seguir obligatoriamente y que se corresponde a los Módulos 4 y 5. El curso está destinado a la adquisición de una formación sólida en aspectos avanzados de la Química Teórica y la Modelización computacional (Teoría de estructura electrónica avanzada, Dinámica química y molecular, Técnicas computacionales avanzadas, Modelización computacional y simulación, Teoría de la materia condensada) y sus aplicaciones (en Nanociencia y nanotecnología, Modelos de sistemas biológicos, Materiales por diseño, Reactividad y Catálisis, Estados excitados, Procesos atmosféricos y del espacio). La enseñanza en dicho curso correrá a cargo de los mejores especialistas dentro del Consorcio y de expertos, sean hombres o mujeres, de terceros países.

El curso se imparte de manera rotatoria en una de las Universidades participantes del "European Master in Theoretical Chemistry and Computational Modelling". Las clases se imparten en inglés al igual que su evaluación. Generalmente se desarrolla a principios del segundo curso académico. Este curso es seguido por trabajos tutelados que desarrolla cada estudiante en su Universidad a lo largo del año bajo la supervisión de un tutor o tutora. Al finalizar el curso intensivo M2, personal perteneciente a compañías de supercomputación como Bull, IBM, Fujitsu, o farmacéuticas como Lilly, BASF, entre otras; impartirán seminarios/talleres sobre empleabilidad que faciliten la adquisición de becas de prácticas, o, una posterior inserción profesional de nuestros egresados.

Como ejemplo se citan los profesores participantes en las dos últimas ediciones y los programados para el próximo curso en Septiembre del 2013. Otras ediciones se pueden consultar en la página web del máster: <http://www.emtccm.org/tccm-em/international-intensive-course>

Sexta edición. Valencia, España-Septiembre 2011.

Nombre/Universidas/País

Alessandro Constantini/University of Perugia/Italy
Alex Gaita Ariño/ICMOL-University of Valencia/Spain
Alejandro Ramirez Solís/Autonomous University of Morelos/Mexico
Begoña Milian Medina/Madrid Institute for Advanced Studies/Spain
Carlo Manuali /University of Perugia/Italy
Coen Van de Graaf/University Robira i Virgili/Tarragona-Spain
Damien Laage/École normale supérieure/Paris-France
Daniel Roca/Uppsala University/Sweden
Enrique Sánchez Marcos/University of Sevilla/Spain
Jesús Navarro Faus/CSIC-Valencia/Spain
Joan Cano Boquera/ICMOL-University of Valencia/Spain
Johannes Gierschner/Madrid Institute for Advanced Studies/Spain
Josep Planelles Fuster/University Jaume I Castellón/Spain
Juan Ignacio Climente/University Jaume I Castellón/Spain
Juan Modesto Clemente/Molecular Science Institute ICMOL/Valencia-Spain
Manuel Yanez/Autonomous University of Madrid/Spain
M Angeles González Lafont/Autonomous University of Barcelona/Spain
Maite Roca/University of Valencia/Spain
Marie Pierre Gageot/University d'Evry/France
Merce Boronat/Institute of Chemical Techonology/Valencia-Spain
Nuno Cerqueira/University of Porto/Portugal
Roar Olsen/Akershus University College/Norway
Sergio Sousa/University of Porto/Portugal
Vicente Moliner Ibañez/University Jaume I Castellón/Spain

Séptima edición. Perugia, Italia-Septiembre 2012.

Nombre/Universidas/País

Remco W.A. Havenith/Zernike Institute for Advanced Materials-University of Groningen/Netherlands
Natalie Guihery/University Paul Sabatier Toulouse III/France
Leonardo Belpassi/University of Perugia/Italy
Sergio Rampino/University of Perugia/Italy
William Hase/Texas Tech University/United States
Alessandro Costantini/University of Perugia/Italy
Josep Planelles Fuster/University Jaume I Castellón/Spain
Manuel Yáñez Montero/Autonomous University of Madrid/Spain
Filippo De Angelis/Institute of Molecular Science and Technologies/Italy
Marco Verdicchio/University of Perugia/Italy
Noelia Faginas Lago/University of Perugia/Italy
Dimitrios Skouteris/University of Perugia/Italy
Andrea Lombardi/University of Perugia/Italy
Maurizio Persico/University of Pisa/Italy
Simon Cross/Molecular Discovery LTD - Perugia/Italy

Octava edición. Madrid, España-Septiembre 2013.

Nombre/Universidas/País

Alberto Luna/Computational techniques/Autonomous University of Madrid - Spain

Ángel Martín Pendás/Wavefunction analysis/University of Oviedo - Spain
Jesús Ugalde/Advanced density functional theory/University of Basque Country - Spain
Remco Havenith/Valence bond/University of Groningen - Netherlands
Nathalie Guilhéry/Multireference techniques/University Paul Sabatier Toulouse III - France
Berta Herrero/Transversals skills/University Carlos III of Madrid, Atria Science - Spain
Noelia Faginas/Molecular dynamics/University of Perugia - Italy
Osvaldo Gervasi/Grid computing/University of Perugia - Italy
Maria Joao Ramos/Modelling of biochemical systems/University of Porto - Portugal
Iñaki Tuñón/Quantum and molecular mechanics methods/University of Valencia - Spain
Leticia González/Methodology in molecular photochemistry/University of Vienna - Austria
Maurizio Persico/Electronically nonadiabatic nuclear motion/University of Pisa -Italy
Ignacio Solá/Coherent interaction of molecules with light/University Complutense of Madrid - Spain
Fabio Busnengo/Solids and surfaces/University of Rosario - Argentina
Jordi Rivas/Magnetism/University of Barcelona - Spain
Arvi Rauk/To be defined/University of Calgary - Canada
Peter Gil/To be defined/Australian National University - Australia

Como mínimo 3 meses del segundo año del Máster (**M2**) deberán realizarse en una Institución de otro país dentro del Consorcio para desarrollar parte de su trabajo de investigación (30 créditos ECTS) asociado a su Tesis de Máster (modulo 6). Esta movilidad de 3 meses constituye una de las señas de identidad del Máster y se considera básica para la formación en un entorno internacional. Solamente en casos muy justificados por causas económicas, porque el coste económico de la estancia sea inabordable para el estudiante y no haya conseguido alguna ayuda para la movilidad, la Comisión de Coordinación Académica del Máster podrá aprobar que no se realice esa estancia. Esta internacionalización es una de las señas de identidad de nuestro máster y es una de las razones que ha contribuido de forma importante al reconocimiento del EuroLabel por parte de la ECTNA. Es por tanto importante que podamos mantener esta exigencia y así ha sido entendido por las autoridades de nuestro ministerio con el apoyo dado durante estos años a la movilidad de profesores, profesoras, alumnos y alumnas. Por tanto seguiremos manteniéndolo como requisito fundamental salvo que la reducción del apoyo a la movilidad nos lo impida.

Finalmente, el **M2** concluirá con la defensa del Trabajo de Fin de Máster en la Institución propia de cada estudiante. Superada con éxito, dicha Institución le otorgará el título de "Máster en Química Teórica y Modelización Computacional", conjunto con las otras Instituciones del Consorcio Europeo. Se dispone de una página web para el Máster Europeo (www.emtccm.org) donde se encuentra la información detallada acerca de la organización de dicho Máster. El Trabajo de Fin de Máster en ningún caso estará sujeto a la convalidación o reconocimiento de competencias.

Las Tablas 3 y 4 recogen ejemplos de horarios previstos para la impartición de asignaturas del M1 y M2, respectivamente. Estos horarios han sido elaborados teniendo en cuenta las horas presenciales que para cada asignatura se recogen en sus correspondientes fichas. El cronograma y horarios propuestos deberán ser refrendados,

anualmente, por los miembros de la Comisión de Coordinación Académica del Máster junto al resto de la programación docente del Centro.

Tabla 3. Horarios del M1.

A. Curso intensivo

	SEMANA 1	SEMANA 2	SEMANA 3	SEMANA 4
9:00 - 11:00	Fundamentos Matemáticos de la Mecánica Cuántica	Mecánica Estadística y aplicaciones en simulación	Profundización en los métodos de la Química Teórica	Profundización en los métodos de la Química Teórica
11:30 - 13:30	Métodos de la Química Teórica I	Métodos de la Química Teórica I	Métodos Avanzados de la Química Teórica II	Métodos Avanzados de la Química Teórica II
15:30 - 17:30	Técnicas Computacionales y Cálculo Numérico	Técnicas Computacionales y Cálculo Numérico	Dinámica de las reacciones químicas	Dinámica de las reacciones químicas
18:00 - 20:00	Simetría en átomos, moléculas y sólidos	Simetría en átomos, moléculas y sólidos	Sólidos	Estados Excitados

B. ZCAM

	Lunes	Martes	Miércoles	Jueves	Viernes
9:00 - 11:00	Teoría 1	Teoría 1	Teoría 3	Teoría 3	Teoría 4
11:30 - 13:30	Teoría 2	Teoría 2	Teoría 4	Teoría 5	Teoría 5
15:30 - 19:30	Sesión de Practica 1	Sesión de Practica 2	Sesión de Practica 3	Sesión de Practica 4	Sesión de Practica 5

Semana 1 - Dinámica de las Reacciones Químicas + Estados excitados

Semana 2 - Sólidos

Tabla 4. Horarios del M2.

A. Curso intensivo

DIA (8 horas lectivas/día)	SEMANA 1	SEMANA 2	SEMANA 3	SEMANA 4
Lunes	Teoría Avanzada de la Estructura Electrónica y de la Materia Condensada Introduction	Dinámica Química y Molecular y Simulación y Modelización por Ordenador	Técnicas Computacionales Avanzadas	Teoría Avanzada de la Estructura Electrónica y de la Materia Condensada
Martes	Teoría Avanzada de la Estructura Electrónica y de la Materia Condensada	Dinámica Química y Molecular y Simulación y Modelización por Ordenador	Técnicas Computacionales Avanzadas	Dinámica Química y Molecular y Simulación y Modelización por Ordenador
	Teoría Avanzada de la Estructura	Dinámica Química y	Dinámica Química y Molecular y	

Miércoles	Electrónica y de la Materia Condensada	Molecular y Simulación y Modelización por Ordenador	Simulación y Modelización por Ordenador	Aplicaciones
Jueves	Teoría Avanzada de la Estructura Electrónica y de la Materia Condensada	Dinámica Química y Molecular y Simulación y Modelización por Ordenador	Dinámica Química y Molecular y Simulación y Modelización por Ordenador	Técnicas Computacionales Avanzadas
Viernes	Teoría Avanzada de la Estructura Electrónica y de la Materia Condensada	Teoría Avanzada de la Estructura Electrónica y de la Materia Condensada	Dinámica Química y Molecular y Simulación y Modelización por Ordenador	Teoría Avanzada de la Estructura Electrónica y de la Materia Condensada

B. Cursos Optativos.

	Lunes	Martes	Miércoles	Jueves	Viernes
9:00 - 11:00	Aplicaciones	Aplicaciones	Aplicaciones	Aplicaciones	Aplicaciones
11:30 - 13:30	Aplicaciones	Aplicaciones	Aplicaciones	Aplicaciones	Aplicaciones
15:30 - 17:30	Técnicas Computacionales Avanzadas	Técnicas Computacionales Avanzadas	Técnicas Computacionales Avanzadas	Aplicaciones	Técnicas Computacionales Avanzadas
18:00 - 20:00	Técnicas Computacionales Avanzadas	Técnicas Computacionales Avanzadas	Técnicas Computacionales Avanzadas	Aplicaciones	Técnicas Computacionales Avanzadas

Mecanismos de Coordinación Docente del Máster

Actuará como **Coordinador o Coordinadora General del Máster** el responsable en la Universidad encargada de coordinar, actualmente la Universidad Coordinadora es la Autónoma de Madrid. La organización y coordinación docente es responsabilidad de la **Comisión de Coordinación Académica del Máster**, cuyas principales funciones relativas a este ámbito serán la de determinar los contenidos de las diferentes asignaturas, evitando solapamientos y reiteraciones y llevar a cabo la propuesta docente de cada curso académico, que incluirá el calendario de clases y exámenes. La Comisión de Coordinación Académica también se encargará de organizar seminarios, visitas y restante actividades del Máster. Esta Comisión también coordinará la movilidad de profesores y profesoras ajenos al Máster que sean invitados a realizar participaciones puntuales. La Comisión de Coordinación Académica del Máster se reunirá tantas veces como sea necesario para supervisar el funcionamiento del Título y analizar el seguimiento del Máster, proponiendo la organización docente del siguiente curso académico y coordinando la selección de nuevos alumnos y alumnas entre las solicitudes presentadas en cada universidad. Esta Comisión propondrá anualmente, para su aprobación, las modificaciones de la programación académica que considere oportunas y estudiará todas aquellas cuestiones que las comisiones de coordinación de cada universidad les hayan hecho llegar. La Comisión de Coordinación Académica del Máster regulará todo caso excepcional en el que se incumplan la normativa de permanencia y la normativa de transferencia y reconocimiento de créditos, propias de alguna de las Universidades. Para llevar a cabo sus actividades de seguimiento, la

Comisión podrá invitar a sus reuniones a profesores, profesoras y estudiantes del Máster, que permitirán recabar la información necesaria.

Para un funcionamiento más operativo la Comisión de Coordinación Académica del Máster nombrará dos subcomisiones:

- **Subcomisión Docente**
- **Subcomisión de Calidad**

La primera Subcomisión se responsabilizará de los aspectos de coordinación académica de asignaturas y hará propuestas sobre la organización de las actividades docentes en cada curso académico, además velará por el cumplimiento coherente de los planes de organización docente. Estará formada por el **Coordinador del máster** y por los **Coordinadores de Módulos**, seis profesores, entre hombres y mujeres, con vinculación permanente a una de las Universidades del Convenio y, como mínimo, un quinquenio de docencia. La **Subcomisión Docente** realizará reuniones de coordinación y seguimiento con cierta regularidad que faciliten la coordinación vertical y el intercambio de experiencias. A su vez, cada miembro de la Subcomisión Docente realizará reuniones con los profesores y profesoras o coordinadoras o coordinadores de asignaturas pertenecientes a su módulo, facilitando la coordinación horizontal.

La responsabilidad docente de las asignaturas impartidas por varios profesores será del **Coordinador de Asignatura** elegido por la **Subcomisión Docente** entre los profesores que imparten docencia en dicha asignatura. Las impartidas en su totalidad por un solo profesor o profesora, corresponderá al anterior su responsabilidad docente. El Coordinador de Asignatura realizará al menos una reunión antes del inicio del curso con los docentes de la asignatura y otra al final de los cursos intensivos.

La **Subcomisión de Calidad**, está compuesta por tres profesores, sean mujeres u hombres, de tres Universidades distintas. Velará por la calidad en la docencia impartida y en el máster en general. Al final del curso intensivo realizará encuestas de satisfacción entre estudiantes que han de tenerse en cuenta para la mejora constante del máster. Integrará la información facilitada por el Sistema de Garantía Interna de Calidad (SGIC) de cada Universidad y empleando los procedimientos derivados del SGIC de la Facultad de Ciencias de la Universidad Autónoma de Madrid (apartado 9 de esta memoria) elaborará los indicadores de seguimiento y control y el informe anual de seguimiento de la calidad que servirá de base a las acciones correctivas que tome la Comisión de Coordinación Académica del Máster.

5.1.2. Planificación y gestión de la movilidad

En el Máster Universitario en Química Teórica y Modelización Computacional se establecen acciones de movilidad específicas. De hecho está previsto que se produzca la movilidad de estudiantes durante el mismo ya que es necesario para alcanzar las competencias previstas. Los convenios de movilidad atienden a la normativa general que sobre reconocimiento de créditos se estableció en el Consejo de Gobierno de la Universidad Autónoma de Madrid en febrero de 2008 y modificado en octubre de 2010 en el que se aprobaron unas normas generales sobre movilidad internacional de estudiantes, que se recogen en el apartado 4.4 de la presente memoria.

La organización de la movilidad de estudiantes para cursar las enseñanzas que se imparten en sedes distintas de la de origen será planificada cada curso académico por la Comisión de Coordinación Académica del Máster que gestionará las solicitudes de ayuda económica a estudiantes a través de las convocatorias oficiales publicadas al efecto. Asimismo, esta Comisión planificará cada curso académico los cursos a impartir por profesoras y profesores de otras Universidades españolas o extranjeras.

En cuanto a la financiación, la participación en estas actividades y estancias se realizarán siempre sin coste adicional para el alumnado ya que se espera disponer del programa de movilidad para estudiantes de Máster del Ministerio de Educación Cultura y Deporte como en ediciones anteriores se dispuso de esta ayuda del Ministerio de Ciencia e Innovación.

En el caso de asistencia a congresos y reuniones científicas se podría contar, entre otros, con las bolsas de viaje que otorgan las universidades a los estudiantes (en general cubren los gastos de viaje de un congreso al año); y con fondos propios de los grupos de investigación a través de proyectos propios, que contemplan siempre financiación para asistencia a congresos. Por esta vía se cubren los gastos de inscripción y los gastos de viaje y asistencia a algunos congresos.

Hasta este momento se ha contado con algunas ayudas externas para las estancias en el extranjero tales como:

- Ayudas de movilidad asociadas a la beca o contrato que posee cada estudiante tanto en el caso de programas del ministerio (FPI o FPU), programas financiados por las Comunidades Autónomas, por la Unión Europea (becas Marie-Curie, Initial Training Networks...) o los programas de becas propias de las universidades. Todos estos programas contemplan ayudas complementarias de movilidad, en general de 3 meses al año.
- Ayudas de movilidad específicas del Ministerio de Educación para estudiantes de Máster en el caso de estudiantes que no tengan alguna beca o contrato de los mencionados anteriormente.
- Programas de intercambio de estudiantes a nivel europeo. En particular se han utilizado frecuentemente ayudas asociadas a proyectos transnacionales en los que participan nuestro personal investigador, tales como: acciones COST, acciones integradas entre España y países europeos y ayudas de movilidad asociadas a los centros de supercomputación europeos (High Performance Computing - Europa, HPC-Europa).
- Ayudas específicas de fundaciones o acuerdos con empresas. El programa de Máster ha establecido acuerdos con compañías de supercomputación como Bull, IBM o Fujitsu y colabora con asociaciones como la APQTC (Asociación para la Promoción de la Química Teórica y Computacional) que oferta ayudas de movilidad.

5.1.3. Descripción detallada de módulos o materias de enseñanza-aprendizaje

MODULO 1. FUNDAMENTOS (20 ECTS)**Asignatura: Lengua Europea.****Carácter: Obligatoria****Créditos: 5 ECTS****Ubicación Temporal y Duración:**

M1, anual.

Competencias que el estudiante adquiere:

CB9, CG03, CT02, CG04, CT04.

Contenidos:

Unidad 1: *The story of my life*
 oTelling and listening to stories.
 oChronological order: sequencing events and using time expressions.

Unidad 2: *Technostress*
 oSaying you're able/ not able to do something.
 oPros and cons: writing about the advantages and disadvantages of a topic.

Unidad 3: *Are you a morning person?*
 oMaking general.
 oDescribing a location: organizing a paragraph using a topic sentence.

Unidad 4: *Change your world*
 oExchanging ideas in a non-confrontational way.
 oExpressing opinion: writing a letter to the editor.

Unidad 5: *Mysterious disappearances*
 oMaking and responding to speculation.
 oWriting a summary: summarizing an article.

Unidad 6: *Work Issues*
 oNegotiating a solution.
 oApplying for a job: writing a cover letter.

Unidad 10: *Trips & travel Plans*
 oExplaining plans and making suggestions.
 oWriting a letter of complaint.

Unidad 12: *Do you know what to do?*
 oDealing with a crisis situation.
 oWriting a short article.

Actividades Formativas:

ACTIVIDAD	HORAS/CARACTER	COMPETENCIAS
A01	40 horas presenciales	CB09, CG03, CG04
A04	3 horas presenciales	CT02, CG04
A10	3 horas presenciales	CG04
A03	4 horas presenciales	CB09, CG04
A02	40 horas no presenciales	CT02, CG04, CT04
A07	35 horas no presenciales	CB09, CG04

Metodología Docente:

M05, M09

Lengua en la que se imparte:

Inglés

Sistema de Evaluación y Sistema de Calificación:

Convocatoria ordinaria.
 E02 10%
 E03 20%
 E11 10%
 E07 60%

Convocatoria extraordinaria.
 NO EXISTE.
 Las calificaciones, de acuerdo con la legislación vigente, se realizan en una escala numérica de 0-10, con un decimal.

MODULO 1. FUNDAMENTOS (20 ECTS)		
Asignatura: Fundamentos matemáticos de la Mecánica Cuántica.		
Carácter: Obligatoria		
Créditos: 5 ECTS		
Ubicación Temporal y Duración:	M1, anual.	
Competencias que el estudiante adquiere:	CB6, CB7, CB08, CB9, CB10, CG01, CT01, CG02, CG03, CT02, CE01, CE04, CE12, CE17.	
Contenidos:	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 polieletronicos 9- Segunda cuantización	
Actividades Formativas:		
ACTIVIDAD	HORAS/CARACTER	COMPETENCIAS
A01	30 horas presenciales	CB6, CB7, CB08, CB9, CG01, CT01, CG02, CT02, CE01, CE04, CE12, CE17
A10	12 horas presenciales	CB6, CB7, CB08, CB9, CG01, CT01, CG02, CG03, CT02, CE01, CE04, CE12, CE17
A02	33 horas no presenciales	CB6, CB7, CB08, CB10, CG01, CT01, CG02, CG03, CT02, CE01, CE04, CE12, CE17
A09	20 horas no presenciales	CB6, CB7, CB08, CB9, CB10, CG01, CT01, CG02, CG03, CT02, CE01, CE04, CE12, CE17
A07	30 horas no presenciales	CB6, CB7, CB08, CB9, CB10, CG01, CT01, CG02, CT02, CE01, CE04, CE12, CE17
Metodología Docente:		
		M01, M02, M03 y M06
Lengua en la que se imparte:		
		Castellano e Inglés.
Sistema de Evaluación y Sistema de Calificación:		
		Convocatoria ordinaria E03 60% E04 40% Convocatoria extraordinaria E07 70% E03 30% Las calificaciones, de acuerdo con la legislación vigente, se realizan en una escala numérica de 0-10, con un decimal.

MODULO 1. FUNDAMENTOS (20 ECTS)																			
Asignatura: Mecánica Estadística y Aplicaciones en simulación.																			
Carácter: Obligatoria																			
Créditos: 5 ECTS																			
Ubicación Temporal y Duración:	M1, anual.																		
Competencias que el estudiante adquiere:	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CG01, CT01, CG02, CE01, CE04, CE09, CE10.																		
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 																		
Actividades Formativas:																			
<table border="1" style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <thead> <tr> <th style="width: 15%;">ACTIVIDAD</th> <th style="width: 20%;">HORAS/CARACTER</th> <th style="width: 65%;">COMPETENCIAS</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>A01</td> <td>25 horas presenciales</td> <td>CB6, CB7, CB8, CB9, CG01, CT01, CG02, CE01, CE04, CE09, CE10.</td> </tr> <tr> <td>A10</td> <td>10 horas presenciales</td> <td>CB6, CB7, CB8, CB9, CG01, CT01, CG02, CE01, CE04, CE09, CE10.</td> </tr> <tr> <td>A02</td> <td>40 horas no presenciales</td> <td>CB6, CB7, CB8, CB10, CG01, CT01, CG02, CE01, CE04, CE09, CE10.</td> </tr> <tr> <td>A09</td> <td>20 horas no presenciales</td> <td>CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CG01, CT01, CG02, CE01, CE04, CE09, CE10.</td> </tr> <tr> <td>A07</td> <td>30 horas no presenciales</td> <td>CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CG01, CT01, CG02, CE01, CE04, CE09, CE10.</td> </tr> </tbody> </table>		ACTIVIDAD	HORAS/CARACTER	COMPETENCIAS	A01	25 horas presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CG01, CT01, CG02, CE01, CE04, CE09, CE10.	A10	10 horas presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CG01, CT01, CG02, CE01, CE04, CE09, CE10.	A02	40 horas no presenciales	CB6, CB7, CB8, CB10, CG01, CT01, CG02, CE01, CE04, CE09, CE10.	A09	20 horas no presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CG01, CT01, CG02, CE01, CE04, CE09, CE10.	A07	30 horas no presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CG01, CT01, CG02, CE01, CE04, CE09, CE10.
ACTIVIDAD	HORAS/CARACTER	COMPETENCIAS																	
A01	25 horas presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CG01, CT01, CG02, CE01, CE04, CE09, CE10.																	
A10	10 horas presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CG01, CT01, CG02, CE01, CE04, CE09, CE10.																	
A02	40 horas no presenciales	CB6, CB7, CB8, CB10, CG01, CT01, CG02, CE01, CE04, CE09, CE10.																	
A09	20 horas no presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CG01, CT01, CG02, CE01, CE04, CE09, CE10.																	
A07	30 horas no presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CG01, CT01, CG02, CE01, CE04, CE09, CE10.																	
Metodología Docente:	M01, M02, M06, M03.																		
Lengua en la que se imparte:	Castellano e Inglés.																		
Sistema de Evaluación y Sistema de Calificación:	<p>Convocatoria ordinaria E03 60% E04 40%</p> <p>Convocatoria extraordinaria E07 70% E03 30%</p> <p>Las calificaciones, de acuerdo con la legislación vigente, se realizan en una escala numérica de 0-10, con un decimal.</p>																		

MODULO 1. FUNDAMENTOS (20 ECTS) Asignatura: Simetría en átomos, moléculas y sólidos. Carácter: Obligatoria Créditos: 5 ECTS		
Ubicación Temporal y Duración:	M1, anual.	
Competencias que el estudiante adquiere:	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CG01, CT01, CE11, CE17.	
Contenidos:	<ol style="list-style-type: none"> 1. Aplicaciones de la teoría de grupos a átomos. 2. Simetría en Moléculas: <ul style="list-style-type: none"> - Simetría: operaciones, grupos puntuales, representación matricial - Aplicaciones de la simetría en Química Cuántica. 3. Simetría en Sólidos: <ul style="list-style-type: none"> - Simetrías espaciales - Estructuras isotrópicas y anisotrópicas - Red recíproca de una red de Bravais. 	
Actividades Formativas:		
ACTIVIDAD	HORAS/CARACTER	COMPETENCIAS
A01	20 horas presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CG01, CT01, CE11, CE17.
A10	20 horas presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CG01, CT01, CE11, CE17.
A02	35 horas no presenciales	CB6, CB7, CB8, CB10, CG01, CT01, CE11, CE17.
A09	20 horas no presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CG01, CT01, CE11, CE17.
A07	30 horas no presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CG01, CT01, CE11, CE17.
Metodología Docente:		
	M01, M02, M06, M03.	
Lengua en la que se imparte:		
	Castellano e Inglés.	
Sistema de Evaluación y Sistema de Calificación:		
	Convocatoria ordinaria E03 60% E04 40% Convocatoria extraordinaria E07 70% E03 30% Las calificaciones, de acuerdo con la legislación vigente, se realizan en una escala numérica de 0-10, con un decimal.	

MODULO 2. MÉTODOS (15 ECTS) Asignatura: Técnicas Computacionales y Cálculo Numérico. Carácter: Obligatoria Créditos: 5 ECTS		
Ubicación Temporal y Duración:	M1, anual.	
Competencias que el estudiante adquiere:	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CG01, CT01, CG02, CT03, CE04, CE13, CE14.	
Contenidos:	Algoritmos y Programación. Programación FORTRAN. Cálculo matricial. Cálculo Integral. Búsqueda de ceros y optimización de funciones. Análisis multivariante.	
Actividades Formativas:		
ACTIVIDAD	HORAS/CARACTER	COMPETENCIAS
A01	20 horas presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CG01, CT01, CG02, CT03, CE04, CE13, CE14.
A04	8 horas presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CG01, CT01, CG02, CT03, CE04, CE13, CE14.
A10	7 horas presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CG01, CT01, CG02, CT03, CE04, CE13, CE14.
A02	40 horas no presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CG01, CT01, CG02, CT03, CE04, CE13, CE14.
A09	20 horas no presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CG01, CT01, CG02, CT03, CE04, CE13, CE14.
A06	30 horas no presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CG01, CT01, CG02, CT03, CE04, CE13, CE14.
Metodología Docente:	M10, M10, M03, M06, M02.	
Lengua en la que se imparte:	Castellano e Inglés.	
Sistema de Evaluación y Sistema de Calificación:	Convocatoria ordinaria E03 60% E04 40% Convocatoria extraordinaria E07 70% E03 30% Las calificaciones, de acuerdo con la legislación vigente, se realizan en una escala numérica de 0-10, con un decimal.	

MODULO 2. MÉTODOS (15 ECTS)		
Asignatura: Métodos de la Química Teórica I.		
Carácter: Obligatoria		
Créditos: 5 ECTS		
Ubicación Temporal y Duración:	M1, anual.	
Competencias que el estudiante adquiere:	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CG01, CT01, CG02, CE01, CE04, CE15, CE16.	
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 	
Actividades Formativas:		
ACTIVIDAD	HORAS/CARACTER	COMPETENCIAS
A01	20 horas presenciales	CB6, CB7, CB9, CG01, CT01, CG02, CE01, CE04, CE15, CE16.
A10	15 horas presenciales	CB6, CB7, CB9, CG01, CT01, CG02, CE01, CE04, CE15, CE16.
A02	40 horas no presenciales	CB6, CB7, CB9, CB10, CG01, CT01, CG02, CE01, CE04, CE15, CE16.
A09	20 horas no presenciales	CB6, CB7, CB9, CB10, CG01, CT01, CG02, CE01, CE04, CE15, CE16.
A07	30 horas no presenciales	CB6, CB7, CB9, CB10, CG01, CT01, CG02, CE01, CE04, CE15, CE16.
Metodología Docente:		
M01, M02, M06, M03.		
Lengua en la que se imparte:		
Castellano e Inglés.		
Sistema de Evaluación y Sistema de Calificación:		
<p>Convocatoria ordinaria E03 60% E04 40%</p> <p>Convocatoria extraordinaria E07 70% E03 30%</p> <p>Las calificaciones, de acuerdo con la legislación vigente, se realizan en una escala numérica de 0-10, con un decimal.</p>		

MODULO 2. MÉTODOS (15 ECTS)		
Asignatura: Métodos de la Química Teórica II.		
Carácter: Obligatoria		
Créditos: 5 ECTS		
Ubicación Temporal y Duración:	M1, anual.	
Competencias y resultados del aprendizaje que el estudiante adquiere:	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CG01, CT01, CG02, CE01, CE04, CE12, CE16.	
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. 	
Actividades Formativas:		
ACTIVIDAD	HORAS/CARACTER	COMPETENCIAS
A01	20 horas presenciales	CB6, CB7, CB9, CG01, CT01, CG02, CE01, CE04, CE12, CE16.
A10	15 horas presenciales	CB7, CB9, CG01, CT01, CG02, CE01, CE04, CE12, CE16.
A02	40 horas no presenciales	CB6, CB7, CB9, CB10, CG01, CT01, CG02, CE01, CE04, CE12, CE16.
A09	20 horas no presenciales	CB6, CB7, CB9, CB10, CG01, CT01, CG02, CE01, CE04, CE12, CE16.
A07	30 horas no presenciales	CB6, CB7, CB9, CB10, CG01, CT01, CG02, CE01, CE04, CE12, CE16.
Metodología Docente:		M01, M02, M06, M03.
Lengua en la que se imparte:		Castellano e Inglés.
Sistema de Evaluación y Sistema de Calificación:		<p>Convocatoria ordinaria E03 60% E04 40%</p> <p>Convocatoria extraordinaria E07 70% E03 30%</p> <p>Las calificaciones, de acuerdo con la legislación vigente, se realizan en una escala numérica de 0-10, con un decimal.</p>

MODULO 3. OPTATIVIDAD (25 ECTS)																			
Asignatura: Profundización en los métodos de la Química Teórica.																			
Carácter: Optativo.																			
Créditos: 5 ECTS																			
Ubicación Temporal y Duración:	M1, anual.																		
Competencias que el estudiante adquiere:	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CG01, CT02, CG02, CE01, CE04, CE15, CE16.																		
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. 																		
Actividades Formativas:																			
	<table border="1"> <thead> <tr> <th>ACTIVIDAD</th> <th>HORAS/CARACTER</th> <th>COMPETENCIAS</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>A01</td> <td>20 horas presenciales</td> <td>CB6, CB7, CB9, CG01, CG02, CE01, CE04, CE15, CE16.</td> </tr> <tr> <td>A10</td> <td>15 horas presenciales</td> <td>CB6, CB7, CB9, CG01, CG02, CE01, CE04, CE15, CE16.</td> </tr> <tr> <td>A02</td> <td>40 horas no presenciales</td> <td>CB6, CB7, CB9, CB10, CG01, CT02, CG02, CE01, CE04, CE15, CE16.</td> </tr> <tr> <td>A09</td> <td>20 horas no presenciales</td> <td>CB6, CB7, CB9, CB10, CG01, CT02, CG02, CE01, CE04, CE15, CE16.</td> </tr> <tr> <td>A07</td> <td>30 horas no presenciales</td> <td>CB6, CB7, CB9, CB10, CG01, CT02, CG02, CE01, CE04, CE15, CE16.</td> </tr> </tbody> </table>	ACTIVIDAD	HORAS/CARACTER	COMPETENCIAS	A01	20 horas presenciales	CB6, CB7, CB9, CG01, CG02, CE01, CE04, CE15, CE16.	A10	15 horas presenciales	CB6, CB7, CB9, CG01, CG02, CE01, CE04, CE15, CE16.	A02	40 horas no presenciales	CB6, CB7, CB9, CB10, CG01, CT02, CG02, CE01, CE04, CE15, CE16.	A09	20 horas no presenciales	CB6, CB7, CB9, CB10, CG01, CT02, CG02, CE01, CE04, CE15, CE16.	A07	30 horas no presenciales	CB6, CB7, CB9, CB10, CG01, CT02, CG02, CE01, CE04, CE15, CE16.
ACTIVIDAD	HORAS/CARACTER	COMPETENCIAS																	
A01	20 horas presenciales	CB6, CB7, CB9, CG01, CG02, CE01, CE04, CE15, CE16.																	
A10	15 horas presenciales	CB6, CB7, CB9, CG01, CG02, CE01, CE04, CE15, CE16.																	
A02	40 horas no presenciales	CB6, CB7, CB9, CB10, CG01, CT02, CG02, CE01, CE04, CE15, CE16.																	
A09	20 horas no presenciales	CB6, CB7, CB9, CB10, CG01, CT02, CG02, CE01, CE04, CE15, CE16.																	
A07	30 horas no presenciales	CB6, CB7, CB9, CB10, CG01, CT02, CG02, CE01, CE04, CE15, CE16.																	
Metodología Docente:	M01, M02, M06, M03.																		
Lengua en la que se imparte:	Castellano e Inglés.																		
Sistema de Evaluación y Sistema de Calificación:	<p>Convocatoria ordinaria E03 60% E04 30% E01 10%</p> <p>Convocatoria extraordinaria E07 70% E03 30%</p> <p>Las calificaciones, de acuerdo con la legislación vigente, se realizan en una escala numérica de 0-10, con un decimal.</p>																		

MODULO 3. OPTATIVIDAD (25 ECTS)
Asignatura: Dinámica de las Reacciones Químicas.
Carácter: Optativo.
Créditos: 5 ECTS

Ubicación Temporal y Duración:	M1, anual.
Competencias que el estudiante adquiere:	CB6, CB7, CB9, CB10, CG01, CT01, CT03, CG04, CE01, CE05, CE26.
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"> o Método de trayectorias. o Cálculos mecano-cuánticos. - Aspectos experimentales de la Dinámica de Reacciones Químicas. - Dinámica en estados excitados <ul style="list-style-type: none"> o Propagación de paquetes de onda o Funciones de correlación o Espectroscopia Pump-Probe o Dinámicas Norn-Oppenheimer y de Ehrenfest o Dinámicas no adiabáticas: Tullysurfacehopping.

Actividades Formativas:

ACTIVIDAD	HORAS/CARACTER	COMPETENCIAS
A01	30 horas presenciales	CB6, CB7, CB9, CG01, CT01, CG04, CE01, CE26.
A08	5 horas presenciales	CB6, CB7, CB9, CG01, CT01, CT03, CG04, CE01, CE05, CE26.
A02	50 horas no presenciales	CB6, CB7, CB9, CB10, CG01, CT01, CG04, CE01, CE26.
A07	40 horas no presenciales	CB6, CB7, CB9, CB10, CG01, CT01, CT03, CG04, CE01, CE05, CE26.

Metodología Docente:	M02, M03, M1, M06 y M10.
Lengua en la que se imparte:	Castellano e Inglés.
Sistema de Evaluación y Sistema de Calificación:	<p>Convocatoria ordinaria E03 60% E04 40%</p> <p>Convocatoria extraordinaria E07 70% E03 30%</p> <p>Las calificaciones, de acuerdo con la legislación vigente, se realizan en una escala numérica de 0-10, con un decimal.</p>

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.

MODULO 3. OPTATIVIDAD (25 ECTS)**Asignatura: Estados Excitados.****Carácter: Optativo.****Créditos: 5 ECTS**

Ubicación Temporal y Duración:	M1, anual.
Competencias que el estudiante adquiere:	CB6, CB7, CB9, CB10, CG01, CT03, CG04, CE04, CE27.
Contenidos:	<ol style="list-style-type: none"> Funciones de energía potencial nuclear <ul style="list-style-type: none"> Aproximación de Born-Oppenheimer Curvas de energía potencial de moléculas diatómicas Superficies de energía potencial de moléculas poliatómicas Interacción de la radiación y la materia <ul style="list-style-type: none"> Modelo clásico de la radiación electromagnética Probabilidad de transición inducida por la radiación Espectros rovibracionales: <ul style="list-style-type: none"> Moléculas diatómicas: niveles de energía y reglas de selección Espectros rotacionales puros y rovibracionales en diatómicas. Moléculas poliatómicas: vibraciones clásica y vibraciones cuánticas. Espectros rovibracionales en poliatómicas. Relajación vibracional en líquidos: métodos experimentales y tratamientos teóricos Conceptos básicos en Fotoquímica Molecular <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. Espectro electrónico: métodos multiconfiguracionales. <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 Espectro electrónico: métodos TD-DFT <ul style="list-style-type: none"> Linear response TDDFT, propagación de la densidad electrónica. Cálculo de espectros, aproximación a los funcionales de intercambio y correlación. Ejemplos.
Actividades Formativas:	
ACTIVIDAD	HORAS/CARACTER
A01	35 horas presenciales
A02	50 horas no presenciales
A07	40 horas no presenciales
COMPETENCIAS	
A01	CB6, CB7, CB9, CG01, CT03, CG04, CE04, CE27.
A02	CB6, CB7, CB9, CB10, CG01, CT03, CG04, CE04, CE27.
A07	CB6, CB7, CB9, CB10, CG01, CT03, CG04, CE04, CE27.
Metodología Docente:	M01, M02, M06 y M03
Lengua en la que se imparte:	Castellano e Inglés.
Sistema de Evaluación y Sistema de Calificación:	Convocatoria ordinaria E03 60% E04 40% Convocatoria extraordinaria E07 70% E03 30% Las calificaciones, de acuerdo con la legislación vigente, se realizan en una escala numérica de 0-10, con un decimal.
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.

MODULO 3. OPTATIVIDAD (25 ECTS)**Asignatura: Sólidos.****Carácter: Optativo.****Créditos: 5 ECTS**

Ubicación Temporal y Duración:	M1, anual.	
Competencias que el estudiante adquiere:	CB6, CB7, CB9, CB10, CG01, CG04, CT03, CE03, CE04, CE28.	
Contenidos:	<ol style="list-style-type: none"> 1. Theoretical Models <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 2. Solids <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 3. Applications <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 	
Actividades Formativas:		
ACTIVIDAD	HORAS/CARACTER	COMPETENCIAS
A01	50 horas presenciales	CB6, CB7, CB9, CG01, CG04, CT03, CE03, CE04, CE28
A02	45 horas no presenciales	CB6, CB7, CB9, CB10, CG01, CG04, CT03, CE03, CE04, CE28
A07	30 horas no presenciales	CB6, CB7, CB9, CB10, CG01, CG04, CT03, CE03, CE04, CE28
Metodología Docente:	M01, M02, M04 y M07	
Lengua en la que se imparte:	Castellano e Inglés.	
Sistema de Evaluación y Sistema de Calificación:	Convocatoria ordinaria E03 60% E04 40% Convocatoria extraordinaria E07 70% E03 30% Las calificaciones, de acuerdo con la legislación vigente, se realizan en una escala numérica de 0-10, con un decimal.	
Observaciones:	CE28. Proporciona la metodología básica para el tratamiento de sistemas periódicos, cristales y polímeros.	

MODULO 3. OPTATIVIDAD (25 ECTS)**Asignatura: Linux y Linux de gestión.****Carácter: Optativo.****Créditos: 5 ECTS**

Ubicación Temporal y Duración:	M1, anual.	
Competencias que el estudiante adquiere:	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CG01, CG02, CT02, CT03, CE23.	
Contenidos:	Hardware. Sistemas operativos tipo UNIX/Linux. Diferentes variantes. Comandos fundamentales. Editor vi. Sistemas de archivos. Administración de sistemas. Programación en shell scripts	
Actividades Formativas:		
ACTIVIDAD	HORAS/CARACTER	COMPETENCIAS
A01	40 horas presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CT03, CG01, CG02, CE23.
A04	10 horas presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CG01, CG02, CT02, CT03, CE23.
A02	35 horas no presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CG01, CG02, CT02, CE23.
A06	30 horas no presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CG01, CG02, CT02, CE23.
A09	10 horas no presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CG01, CG02, CT02, CE23.
Metodología Docente:		
	M01, M10, M02, M07	
Lengua en la que se imparte:		
	Castellano e Inglés.	
Sistema de Evaluación y Sistema de Calificación:		
	Convocatoria ordinaria E03 60% E04 40% Convocatoria extraordinaria E07 70% E03 30% Las calificaciones, de acuerdo con la legislación vigente, se realizan en una escala numérica de 0-10, con un decimal.	
Observaciones:		
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.		

MODULO 3. OPTATIVIDAD (25 ECTS)
Asignatura: Laboratorio de Química Teórica Aplicada.
Carácter: Optativo.
Créditos: 5 ECTS

Ubicación Temporal y Duración:	M1, anual.
Competencias que el estudiante adquiere:	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CG01, CG02, CT02, CT03.
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>

Actividades Formativas:

ACTIVIDAD	HORAS/CARACTER	COMPETENCIAS
A05	40 horas presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CG01, CG02, CT03.
A04	10 horas presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CG01, CG02, CT02, CT03.
A02	35 horas no presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CG01, CG02, CT02.
A06	30 horas no presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CG01, CG02, CT02.
A09	10 horas no presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CG01, CG02, CT02.

Metodología Docente:	M01, M10, M02, M06
Lengua en la que se imparte:	Castellano e Inglés.
Sistema de Evaluación y Sistema de Calificación:	<p>Convocatoria ordinaria E03 60% E04 40%</p> <p>Convocatoria extraordinaria E07 70% E03 30%</p> <p>Las calificaciones, de acuerdo con la legislación vigente, se realizan en una escala numérica de 0-10, con un decimal.</p>

MODULO 3. OPTATIVIDAD (25 ECTS)**Asignatura: Láseres.****Carácter: Optativo.****Créditos: 5 ECTS**

Ubicación Temporal y Duración:	M1, anual.	
Competencias que el estudiante adquiere:	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CG01, CE01, CT03, CT04, CE24.	
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. Espectroscopía 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>	
Actividades Formativas:		
ACTIVIDAD	HORAS/CARACTER	COMPETENCIAS
A01	34 horas presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CG01, CT03, CE01, CE24.
A10	10 horas presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CG01, CT03, CE01, CE24.
A04	6 horas presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CG01, CE01, CT04, CE24.
A02	35 horas no presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CG01, CE01, CT04, CE24.
A09	20 horas no presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CG01, CE01, CT04, CE24.
A07	20 horas no presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CG01, CE01, CT04, CE24.
Metodología Docente:	M01, M02, M06.	
Lengua en la que se imparte:	Castellano e Inglés.	
Sistema de Evaluación y Sistema de Calificación:	<p>Convocatoria ordinaria E03 60% E04 40%</p> <p>Convocatoria extraordinaria E07 70% E03 30%</p> <p>Las calificaciones, de acuerdo con la legislación vigente, se realizan en una escala numérica de 0-10, con un decimal.</p>	
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.	

MODULO 3. OPTATIVIDAD (25 ECTS)**Asignatura: Bioquímica Computacional.****Carácter: Optativo.****Créditos: 5 ECTS**

Ubicación Temporal y Duración:	M1, anual.
Competencias que el estudiante adquiere:	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CG01, CG02, CT01, CT02, CT03, CE01, CE03, CE04, CE05, CE25.
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.

Actividades Formativas:

ACTIVIDAD	HORAS/CARACTER	COMPETENCIAS
A01	20 horas presenciales	CB6, CG01, CT01, CT03, CE03, CE25
A03	3 horas presenciales	CB9, CB10, CG01, CT01, CE01, CE25
A04	7 horas presenciales	CB6, CB7, CB8, CG01, CG02, CT01, CT03, CE04, CE05, CE25
A05	20 horas presenciales	CB7, CB8, CG01, CT01, CG02, CT02, CE01, CE04, CE25
A06	16 horas no presenciales	CB9, CG01, CT01, CE01, CE25
A02	59 horas no presenciales	CB6, CB8, CG01, CT01, CE03, CE25

Metodología Docente:	M01, M02, M10, M06, M07.
Lengua en la que se imparte:	Castellano e inglés
Sistema de Evaluación y Sistema de Calificación:	<p>Convocatoria ordinaria E01: 10% E02: 30% E06: 60%</p> <p>Convocatoria extraordinaria E07 60% E08 40%</p> <p>Las calificaciones, de acuerdo con la legislación vigente, se realizan en una escala numérica de 0-10, con un decimal.</p>

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

MODULO 4. ASPECTOS AVANZADOS (15 ECTS)		
Asignatura: Teoría Avanzada de la Estructura Electrónica y de la Materia Condensada.		
Carácter: Obligatorio.		
Créditos: 9 ECTS		
Ubicación Temporal y Duración:	M2, anual.	
Competencias que el estudiante adquiere:	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CG01, CG04, CT01, CE20, CE21.	
Contenidos:	<ul style="list-style-type: none"> - Valence Bond Theory - Multi-reference methods - Análisis de la función de onda (AIM, ELF, NBO...) - Estructura electrónica de sólidos y magnetismo. 	
Actividades Formativas:		
ACTIVIDAD	HORAS/CARACTER	COMPETENCIAS
A01	56 horas presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CG01, CT01, CG04, CE20, CE21.
A10	8 horas presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CG01, CT01, CG04, CE20, CE21.
A02	65 horas no presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CG01, CT01, CG04, CE20, CE21.
A09	36 horas no presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CG01, CT01, CG04, CE20, CE21.
A07	60 horas no presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CG01, CT01, CG04, CE20, CE21.
Metodología Docente:		M01, M02, M03 y M06
Lengua en la que se imparte:		Inglés
Sistema de Evaluación y Sistema de Calificación:		Convocatoria ordinaria E03 60% E04 40% Convocatoria extraordinaria E07 70% E03 30% Las calificaciones, de acuerdo con la legislación vigente, se realizan en una escala numérica de 0-10, con un decimal.

MODULO 4. ASPECTOS AVANZADOS (15 ECTS)**Asignatura: Técnicas Computacionales Avanzadas.****Carácter: Obligatorio.****Créditos: 6 ECTS**

Ubicación Temporal y Duración:	M2, anual.	
Competencias que el estudiante adquiere:	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CG01, CT01, CG04, CE22.	
Contenidos:	<ul style="list-style-type: none"> - EGEE Grid infrastructure: herramientas y servicios. - UNIX avanzado - Paralelización. 	
Actividades Formativas:		
ACTIVIDAD	HORAS/CARACTER	COMPETENCIAS
A01	32 horas presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CG01, CT01, CG04, CE22.
A04	10 horas presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CG01, CT01, CG04, CE22.
A02	50 horas no presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CG01, CT01, CG04, CE22.
A09	23 horas no presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CG01, CT01, CG04, CE22.
A06	35 horas no presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CG01, CT01, CG04, CE22.
Metodología Docente:		M10, M03, M06, M02.
Lengua en la que se imparte:		Inglés
Sistema de Evaluación y Sistema de Calificación:		Convocatoria ordinaria E03 60% E04 40% Convocatoria extraordinaria E07 70% E03 30% Las calificaciones, de acuerdo con la legislación vigente, se realizan en una escala numérica de 0-10, con un decimal.

MODULO 5. MODELIZACIÓN AVANZADA Y APLICACIONES (15 ECTS)
Asignatura: Dinámica Química y Molecular y Simulación y Modelización por Ordenador.
Carácter: Obligatorio.
Créditos: 9 ECTS

Ubicación Temporal y Duración:	M2, anual.
Competencias que el estudiante adquiere:	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CG01, CT01, CG04, CE01, CE18, CE19.
Contenidos:	<ul style="list-style-type: none"> - Dinámica molecular. Fundamentos teóricos. - Método Carr-Parrinello. - Teoría del estado de transición: desafíos y aplicaciones. - Modelos teóricos para química en solución: bases y aplicaciones - Acoplamiento entre electrones y núcleos. - Uso de métodos híbridos. - Relaciones estructura-reactividad.

Actividades Formativas:

ACTIVIDAD	HORAS/CARACTER	COMPETENCIAS
A01	56 horas presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CG01, CT01, CG04, CE01, CE18, CE19.
A10	7 horas presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CG01, CT01, CG04, CE01, CE18, CE19.
A02	66 horas no presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CG01, CT01, CG04, CE01, CE18, CE19.
A09	36 horas no presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CG01, CT01, CG04, CE01, CE18, CE19.
A07	60 horas no presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CG01, CT01, CG04, CE01, CE18, CE19.

Metodología Docente:	M01, M02, M03 y M06
Lengua en la que se imparte:	Inglés
Sistema de Evaluación y Sistema de Calificación:	<p>Convocatoria ordinaria E03 60% E04 40%</p> <p>Convocatoria extraordinaria E07 70% E03 30%</p> <p>Las calificaciones, de acuerdo con la legislación vigente, se realizan en una escala numérica de 0-10, con un decimal.</p>

MODULO 5. MODELIZACIÓN AVANZADA Y APLICACIONES (15 ECTS)**Asignatura: Aplicaciones.****Carácter: Obligatorio.****Créditos: 6 ECTS**

Ubicación Temporal y Duración:	M2, anual.																		
Competencias que el estudiante adquiere:	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CG01, CG04, CT01, CT03, CT04, CE01, CE03.																		
Contenidos:	<p>Cada edición del curso intensivo tiene libertad para seleccionar las aplicaciones que quiera abarcar con los estudiantes.</p> <p>Hasta el momento se han trabajado temas como: reactividad y catálisis, dinámicas y espectroscopia de estados excitados, herramientas probabilísticas y propagación de la incertidumbre, modelización de sistemas biológicos y diseño de materiales; como ejemplos de aplicaciones de la Química Teórica y Modelización Computacional al mundo real.</p>																		
Actividades Formativas:																			
<table border="1"><thead><tr><th>ACTIVIDAD</th><th>HORAS/CARACTER</th><th>COMPETENCIAS</th></tr></thead><tbody><tr><td>A01</td><td>32 horas presenciales</td><td>CB6, CB7, CB8, CB9, CG01, CT01, CG04, CE01, CE03, CT03.</td></tr><tr><td>A10</td><td>10 horas presenciales</td><td>CB6, CB7, CB8, CB9, CG01, CT01, CG04, CE01, CE03, CT03.</td></tr><tr><td>A02</td><td>44 horas no presenciales</td><td>CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CG01, CT01, CG04, CE01, CE03, CT04.</td></tr><tr><td>A09</td><td>24 horas no presenciales</td><td>CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CG01, CT01, CG04, CE01, CE03, CT04.</td></tr><tr><td>A07</td><td>40 horas no presenciales</td><td>CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CG01, CG04, CE01, CE03, CT04.</td></tr></tbody></table>	ACTIVIDAD	HORAS/CARACTER	COMPETENCIAS	A01	32 horas presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CG01, CT01, CG04, CE01, CE03, CT03.	A10	10 horas presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CG01, CT01, CG04, CE01, CE03, CT03.	A02	44 horas no presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CG01, CT01, CG04, CE01, CE03, CT04.	A09	24 horas no presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CG01, CT01, CG04, CE01, CE03, CT04.	A07	40 horas no presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CG01, CG04, CE01, CE03, CT04.	
ACTIVIDAD	HORAS/CARACTER	COMPETENCIAS																	
A01	32 horas presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CG01, CT01, CG04, CE01, CE03, CT03.																	
A10	10 horas presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CG01, CT01, CG04, CE01, CE03, CT03.																	
A02	44 horas no presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CG01, CT01, CG04, CE01, CE03, CT04.																	
A09	24 horas no presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CG01, CT01, CG04, CE01, CE03, CT04.																	
A07	40 horas no presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CG01, CG04, CE01, CE03, CT04.																	
Metodología Docente:	M01, M02, M03 y M06																		
Lengua en la que se imparte:	Inglés																		
Sistema de Evaluación y Sistema de Calificación:	Convocatoria ordinaria E03 60% E04 40% Convocatoria extraordinaria E07 70% E03 30% Las calificaciones, de acuerdo con la legislación vigente, se realizan en una escala numérica de 0-10, con un decimal.																		

MODULO 6. Trabajo Fin de Máster (30 ECTS)		
Asignatura: Trabajo Fin de Máster.		
Carácter: Obligatorio.		
Créditos: 30 ECTS		
Ubicación Temporal y Duración:	M2, anual.	
Competencias que el estudiante adquiere:	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CG01, CG02, CG03, CG04, CT01, CT02, CT03, CT04, CE01, CE02, CE03, CE04, CE05, CE06, CE09, CE10, CE11, CE12, CE13, CE14, CE15, CE16, CE17, CE18, CE19, CE20, CE21, CE22, CE23, CE24, CE25, CE26, CE27, CE28.	
Contenidos:	Diseño, planificación y desarrollo de un proyecto de investigación original.	
Actividades Formativas		
ACTIVIDAD	HORAS/CARACTER	COMPETENCIAS
A12	230 horas presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CG01, CT01, CG02, CG03, CT02, CT03, CG04, CE01, CE02, CE03, CE04, CE05, CT04, CE06, CE09, CE10, CE11, CE12, CE13, CE14, CE15, CE16, CE23, CE24, CE25, CE17, CE26, CE27, CE28, CE18, CE19, CE20, CE21, CE22.
A04	20 horas presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CG01, CT01, CG02, CG03, CT02, CT03, CG04, CE01, CE02, CE03, CE04, CE05, CT04, CE06, CE09, CE10, CE11, CE12, CE13, CE14, CE15, CE16, CE23, CE24, CE25, CE17, CE26, CE27, CE28, CE18, CE19, CE20, CE21, CE22.
A10	46 horas presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CG01, CT01, CG04, CE01, CE02, CE03, CE04, CE05, CT04, CE09, CE10, CE11, CE12, CE13, CE14, CE15, CE16, CE23, CE24, CE25, CE17, CE26, CE27, CE28, CE18, CE19, CE20, CE21, CE22.
A08	4 horas presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CG01, CT01, CG02, CG03, CT02, CT03, CG04, CE01, CE02, CE03, CE04, CE05, CT04, CE09, CE10, CE11, CE12, CE13, CE14, CE15, CE16, CE23, CE24, CE25, CE17, CE26, CE27, CE28, CE18, CE19, CE20, CE21, CE22.
A02	380 horas no presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CT01, CG02, CG03, CT02, CT03, CG04, CE01, CE02, CE03, CE04, CE05, CT04, CE06, CE09, CE10, CE11, CE12, CE13, CE14, CE15, CE16, CE23, CE24, CE25, CE17, CE26, CE27, CE28, CE18, CE19, CE20, CE21, CE22.
A11	10 horas no presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CG02, CT02, CT03, CG04, CE01, CE02, CE03, CE04, CE05, CT04, CE06, CE09, CE10, CE11, CE12, CE13, CE14, CE15, CE16, CE23, CE24, CE25, CE17, CE26, CE27, CE28, CE18, CE19, CE20, CE21, CE22.
A13	60 horas no presenciales	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CG01, CT01, CG02, CG03, CT02, CT03, CG04, CE01, CE02, CE03, CE04, CE05, CT04, CE06, CE09, CE10, CE11, CE12, CE13, CE14, CE15, CE16, CE23, CE24, CE25, CE17, CE26, CE27, CE28, CE18, CE19, CE20, CE21, CE22.
Metodología Docente:	M03, M05, M07, M08, M09.	
Lengua en la que se imparte:	Español e Inglés.	
Sistema de Evaluación y Sistema de Calificación:	E10.	

Tabla de Adaptación de Asignaturas.

ESTRUCTURA ACTUAL				ESTRUCTURA PROPUESTA			
ASIGNATURA	CURSO	TIPO	ECTS	ASIGNATURA	CURSO	TIPO	ECTS
Módulo 1. Nivelación (máximo 10 ECTS)				Complementos Formativos			
Cuso de Nivelación en Química	1	OP/OB	5.0	Cuso de Nivelación en Química			
Curso de Nivelación en Física	1	OP/OB	5.0	Curso de Nivelación en Física			
Curso de Nivelación en Matemáticas	1	OP/OB	5.0	Curso de Nivelación en Matemáticas			
Módulo 2. Fundamentos (15 ECTS)				Módulo 1. Fundamentos (20 ECTS)			
Curso de Lengua Europea	1	OB	5.0	Curso de Lengua Europea	1	OB	5.0
Fundamentos Matemáticos de la Química Teórica	1	OB	5.0	Fundamentos Matemáticos de la Mecánica Cuántica	1	OB	5.0
Métodos de la Química Cuántica y la Mecánica estadística	1	OB	10.0	Mecánica Estadística y aplicaciones en simulación	1	OB	5.0
Módulo 3. Técnicas (6 ECTS)				Simetría en átomos, moléculas y sólidos	1	OB	5.0
Técnicas Computacionales y Cálculo Numérico	1	OB	6.0	Módulo 2. Métodos (15 ECTS)			
Módulo 4. Aplicaciones (9 ECTS)				Técnicas Computacionales y Cálculo Numérico	1	OB	5.0
Simetría en átomos, moléculas y sólidos y Mecánica Cuántica	1	OB	9.0	Métodos de la Química Teórica I	1	OB	5.0
Módulo 5. Optatividad (entre 15 y 25 ECTS)				Métodos de la Química Teórica II	1	OB	5.0
Dinámica	1	OP	5.0	Módulo 3. Optatividad (25 ECTS)			
Estados Excitados	1	OP	5.0	Profundización en los métodos de la Química Teórica	1	OP	5.0
Métodos Avanzados de la Química Cuántica	1	OP	5.0	Dinámica de las Reacciones Químicas	1	OP	5.0
Sólidos	1	OP	5.0	Estados Excitados	1	OP	5.0
Modelización de procesos de interés en Química de la Atmósfera y Astroquímica	1	OP	5.0	Sólidos	1	OP	5.0
Teoría del Caos: Fundamentos y aplicaciones	1	OP	5.0	Linux y Linux de gestión	1	OP	5.0
Efectos relativistas y potenciales efectivos de Core	1	OP	5.0	Laboratorio de Química Teórica Aplicada	1	OP	5.0
Ionización y disociación por pulsos láser ultracortos	1	OP	5.0	Láseres	1	OP	5.0
Formación en Unix y Unix de gestión	1	OP	5.0	Bioquímica Computacional	1	OP	5.0
Módulo 6. Aspectos avanzados (15 ECTS)				Módulo 4. Aspectos avanzados (15 ECTS)			
Teoría Avanzada de la Estructura Electrónica y de la Materia Condensada	2	OB	9.0	Teoría Avanzada de la Estructura Electrónica y de la Materia Condensada	2	OB	9.0
Técnicas Computacionales Avanzadas	2	OB	6.0	Técnicas Computacionales Avanzadas	2	OB	6.0
Módulo 7. Modelización avanzada y aplicaciones (15 ECTS)				Módulo 5. Modelización avanzada y aplicaciones (15 ECTS)			
Dinámica Química y Molecular y Simulación y Modelización por Ordenador	2	OB	9.0	Dinámica Química y Molecular y Simulación y Modelización por Ordenador	2	OB	9.0
Aplicaciones	2	OB	6.0	Aplicaciones	2	OB	6.0
Módulo 8. Tesis de Máster (30 ECTS)				Módulo 6. Trabajo Fin de Máster (30 ECTS)			
Trabajo de Iniciación a la Investigación (Tesis de Máster)	2	OB	30.0	Trabajo Fin de Máster	2	OB	30.0