

## Máster Universitario en Química Teórica y Modelización Computacional

### Estructura del plan de estudios:

Tipo de materia	ECTS
Obligatorias	47
Optativas	43
Trabajo fin de Máster	30
Total	120

CÓDIGO	ASIGNATURA	SEMESTRE	CARÁCTER	ECTS	MÓDULO
33422	Competencia Científica y Lingüística Transversal	1/2 Anual	Obligatoria	5	1
32523	Fundamentos Matemáticos de la Mecánica Cuántica	1/2 Anual	Obligatoria	5	1
32524	Mecánica Estadística y aplicaciones en simulación	1/2 Anual	Obligatoria	5	1
32525	Simetría en átomos, moléculas y sólidos	1/2 Anual	Obligatoria	5	1
32526	Técnicas Computacionales y Cálculo Numérico	1/2 Anual	Obligatoria	5	2
32527	Métodos de la Química Teórica I	1/2 Anual	Obligatoria	5	2
32528	Métodos de la Química Teórica II	1/2 Anual	Obligatoria	5	2
32529	Profundización en los Métodos de la Química Teórica	1/2 Anual	Optativa	5	2
30576	Dinámica de las Reacciones Químicas	1/2 Anual	Optativa	5	2
31246	Estados Excitados	1/2 Anual	Optativa	5	3
31248	Sólidos	1/2 Anual	Optativa	5	3
32530	Linux y Linux de gestión	1/2 Anual	Optativa	5	3
32531	Laboratorio de Química Teórica Aplicada	1/2 Anual	Optativa	5	3
32532	Láseres	1/2 Anual	Optativa	5	3
32533	Bioquímica Computacional	1/2 Anual	Optativa	5	3
33423	Métodos Avanzados en Estructura Electrónica, Dinámica y Modelización Molecular	3/4 Anual	Obligatoria	12	4
31236	Técnicas Computacionales Avanzadas	3/4 Anual	Optativa	6	5
33424	Multiescala, Machine Learning y métodos QSAR aplicados a				
33425	Métodos teóricos para la simulación de materiales	3/4 Anual	Optativa	6	5

33426	Proyecto de programación de química computacional	3/4 Anual	Optativa	6	5
33427	De la teoría a la implementación: tutoriales en química teórica	3/4 Anual	Optativa	6	5
31239	Tesis de Máster	3/4 Anual	Obligatoria	30	6

### Programas y Guías docentes de las asignaturas

#### **Información del Plan de Estudios**

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 (20 ECTS); módulo 2. Métodos (15 ECTS); módulo 3. Optatividad (25 ECTS); módulo 4. Aspectos avanzados (15 ECTS); módulo 5. Modelización avanzada y aplicaciones (15 ECTS); y módulo 6. Trabajo de Fin de Máster (30 ECTS)) dentro de un perfil investigador.

En el primer año (M1) se trabajan los 3 primeros módulos con un total de 12 asignaturas.

El módulo 1 y 2 tienen carácter obligatorio. El módulo 3 está compuesto de 8 asignaturas optativas, de las cuales se deben seguir 5 de ellas.

5 ECTS dentro del módulo 1 se destinarán a mejorar el conocimiento en una de lengua europea, distinta de la vernácula.

En todas las asignaturas las clases del curso se impartirán en castellano o en inglés. El idioma en el que cada estudiante desarrolle su evaluación es de libre elección (español o inglés).

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. 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.

El primer año tiene carácter nacional mientras que el segundo año (M2) es de carácter internacional. Las 14 universidades del programa hacen parte del Consorcio creador del máster europeo en "Theoretical Chemistry and Computational Modelling", por lo tanto sus estudiantes deberán seguir obligatoriamente un curso internacional intensivo de cuatro semanas con el cual reunirán 30 créditos (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).

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. 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; imparten seminarios/talleres sobre empleabilidad que faciliten la adquisición de becas de prácticas, o, una posterior inserción profesional de nuestros egresados.

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).

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. El Trabajo de Fin de Máster en ningún caso estará sujeto a la convalidación o reconocimiento de competencias.

**Módulos:**

1. Fundamentos
2. Métodos
3. Optatividad
4. Aspectos avanzados
5. Modelización avanzada y aplicaciones
6. Trabajo Fin de Máster

**Avisos**

Según los acuerdos de la Comisión de Estudios de Posgrado de la UAM, aquellas asignaturas optativas que tengan menos de cinco estudiantes matriculados podrán no impartirse. Se avisará a los estudiantes afectados para su reubicación y matrícula en otras asignaturas.

La oferta de asignaturas optativas podría sufrir pequeñas modificaciones antes del comienzo de las clases por razones de ajustes en la ordenación docente del Máster, en cuyo caso, se anunciarían adecuadamente.