MÁSTER UNIVERSITARIO EN: QUIMICA TEÓRICA Y MODELIZACIÓN COMPUTACIONAL (THEORETICAL CHEMISTRY AND COMPUTATIONAL MODELLING)

Páginas web: www.usal.es/dinmol; www.emtccm.org

CURSO 2011 - 2012

ÓRGANO ACADÉMICO RESPONSABLE

Universidad de Salamanca – Facultad de Ciencias Químicas

Departamento de Química Física

Plaza de la Merced s/n 37008 - Salamanca

Tel. (34) 923 294 485

INSTITUCIONES COLABORADORAS

- · Katholieke Universiteit Leuven
- Ecole Nat. Sup. de Chimie de Paris
- Ecole Normale Supérieure de Lyon
- · Rijksuniversiteit Groningen
- Université Claude Bernard LYON 1
- Universite d'Evry-Val-d'Essonne
- Université Denis-Diderot, Paris 7
- Université Henri Poincaré, Nancy 1
- Université Joseph Fourier Grenoble I
- Université Louis Pasteur Strasbourg I
- Université de Marne la Vallée
- Université Montpellier 2
- Université Paris-Sud 11
- Université de Pau et Pays de l'Adour
- Université Paul Cézanne (Aix-Marseille3)
- Université P. et M. Curie, Paris 6
- Université de Provence (Aix-Marseille I)
- Université de Rennes 1
- · Università degli studi di Pisa
- Università degli studi della Calabria
- Università degli studi di Trieste
- Uniwersytet Warszawski
- Universidade de Lisboa
- Universidade do Porto
- Universidad Autónoma de Madrid (coordinadora)
- Universitat Autónoma Barcelona
- Universidad de Cantabria
- Universidad de Extremadura
- Universitat de Girona
- Universidad de Granada
- Universidad de las Islas Baleares
- Universidad Jaume I de Castellón
- Universidad de Murcia
- Universidad de Oviedo
- Universidad del País Vasco/ Euskal Herriko Unibertsitatea
- Universitat Rovira i Virgili
- Universidad de Santiago de Compostela
- Universidad de Sevilla
- Universitat de València
- Universidad de Valladolid
- Universidad de Vigo

DIRECTOR Y RESPONSABLE ACADÉMICO

José Ma Alvariño Herrero

Departamento de Química Física

Facultad de Ciencias Químicas

Universidad de Salamanca

Plaza de la Merced s/n 37008 - Salamanca

Tel. (34) 923 294 485

alva@usal.es

TIPO DE FORMACIÓN		CAMPOS CIENTIFICOS D	EL MASTE	R	
Académica		Ciencias Experimentales	X	Enseñanzas Técnicas	
Profesional		Ciencias de la Salud		Humanidades	
Investigadora	X	Ciencias Sociales y Jurídica	s 🗆		

DESCRIPCIÓN Y OBJETIVOS

Master Europeo (con EuroLabel) en "Theoretical Chemistry and Computational Modelling / Química Teórica y Modelización Computacional" (120 E CTS). Máster Erasmus Mundus del que la Universidad de Salamanca es Universidad asociada.

Objetivos:

- 1. Promover la formación de nuevos investigadores en la especialidad de Química Teórica
- 2. Promover mediante la movilidad interuniversitaria el intercambi o y el conocimiento mutuo de los grupos de investigación españoles.
- 3. Favorecer las colaboraciones científic as y las re laciones humanas de alumnos y profesores de distintas universidades y comunidades autónomas.

Más información: www.emtccm.org

PERFIL/ES DE INGRESO Y REQUISITOS DE FORMACIÓN PREVIA

Licenciado o Graduado en Química, Fí sica u otra titulación científica a juicio de la comisión académica del Master.

CRITERIOS DE ADMISIÓN Y SELECCIÓN

Según la titulación puede ser necesa rio cursar hasta 2 de las 3 asignaturas de nivelación del Módulo 1 que se ofertan y el curso de lengua europea del Módulo 2.

En aquellos casos en que el estudiante requier a, a juicio del tutor, una adecuación de sus conocimientos para ac ceder al Ma ster, deberá seguir un curso de nivelación, hasta un máximo de 10 créditos. Este curso contendrá módulos de 5 créditos cada uno, en Matemáticas, Física y Química.

FECHAS, CENTRO Y AULAS DONDE SE IMPARTIRÁ

De septiembre a junio, de acuerdo con las siguientes particularidades:

Primer curso (Curso de Nivelación/Lengua Europea + Curso intensivo (nivel nacional) + Optativas):

Las materias obligatorias y alguna s optativas del primer año se imparten en un curso intensivo de u n

mes de duración que, en el año académico 2011-2012, se desarrollará en la Universidad de Oviedo. El resto de las asignaturas se imparten en la Universidad de Salamanca (aulas de la Facultad de Ciencias Químicas).

Segundo curso (Curso Intensivo (nivel europeo) + Introducción a la Investigación, Estancia en Laboratorio europeo + Tesis de Master):

Tanto las m aterias obligatorias co mo las opta tivas se de sarrollarán en un Curs o Intensivo en lengua inglesa, que en el curso académico 2011-2012, tendrá lugar en la Universidad de Valencia (España).

CARACTERÍSTICAS GENERALES

Créditos: 120

Duración EN CURSOS ACADÉMICOS: 2

Número de plazas:

Mínimo: 1 Máximo: 10

LISTA DE PROFESORES

Profesores de la Universidad de Salamanca:

José Mª A Ivariño Herrero, Mª Dolores González Sánchez, Jesús Aldegunde Carrión y Susa na Gómez Carrasco.

Profesores de otras Universidades:

Los designados cada año, dentro de las instituciones del consorcio, tanto españolas como europeas.

CRITERIOS DE EVALUACIÓN

En general se exige una combinación de examen presencial escrito/oral, participación activa en clase y trabajo final. El peso específico de cada punto dependerá del profesorado de cada asignatura.

Trabajos fin de curso: cada alumno/a concretará con su docente-tutor/a.

Prácticas externas: el tutor académico (interno) valora el informe final del tutor laborar (externo).

PRÁCTICAS EXT ERNAS Y ACTIVIDADES FORMATI VAS A DESARRO LLAR E N ORGANISMOS COLABORADORES

Las prácticas correspo ndientes a los Módulo s 6 y 7 y al 8 (Tesis de Master) se desarrollarán en universidades no espa ñolas y las de los módulos 2- 5 en un cent ro español. Todo ello dentro del consorcio.

Las estancias de un mes en los cursos intensivos, y la movilidad de tres meses en un laboratorio europeo se financian con cargo a becas de movilidad del Ministerio de Educación.

	,		
DDEVE	DESCRIPCION DE	TI OS CONTENIDO)C

PROGRAMACIÓN ACADÉMICA

MÓDULO 1: Nivelación (máx. 10 ECTS) (suma de ECTS cursados en este módulo y el 5 igual a 25)

	Curso de nivelación 3150	en Química				
		Créditos de aprendizaje				
Tipo (1): O	Créditos ECTS: 5	Teóricos: 5	Prácticos: O	Trabajo personal y otras actividades: 7,5		
Nivel (2): Básico)					
Profesor/es (3): \$	Susana Gómez Carra	sco (2,5 ECTS),	M ^a Dolores Gonzále	z Sánchez (2,5 ECTS)		
Lugar de impai	rtición: USAL	Fecha (4): 1º CU	ırso, 1º semestre	Horario: Por determinar		
Objetivos (5):	Contenidos: Estruct	ura Molecular. E	nlace Químico. Reac	tividad Química. Cinética Química.		
Fudamentos de	Espectroscopía. Requis	sitos previos rec	comendados: Requisi	tos generales		

			Créditos de aprendiza	ije
Tipo (1): O	Créditos ECTS: 5	Teóricos: 5	Prácticos: O	Trabajo personal y otras actividades: 7,5
Nivel (2): Bási	со			
Profesor/es (3)	: Jesús J. Aldegunde (Carrión		
Lugar de imp	artición: USAL	Fecha (4): 1º Cu	irso, 1º semestre	Horario: Por determinar
		` ′	,	Horario: Por determinar Métodos aproximados en Mecánio

			Créditos de aprendi	zaje
Tipo (1): O	Créditos ECTS: 5	Teóricos: 5	Prácticos:	Trabajo personal y otras actividades: 7,5
Profesor/es (3)	: Susana Gomez Carra	asco (2,5 ECIS),	mª Dolores Gonza	lez Sánchez (2,5 ECTS)
Lugar de imp	artición: USAL	Fecha (4): 1º cu	ırso, 1º semestre	Horario: Por determinar
	artición: USAL	, ,		Horario: Por determinar n Física Cuántica. Introducción a lo

MÓDULO 2: Fundamentos (20 ECTS)

ASIGNATUR	A: Curso de Lengua	europea (INGLE	S)		
Código: 303	140				
			Créditos de aprendiza	nje	
Tipo (1): O	Créditos ECTS: 5	Teóricos: 5	Prácticos: 0	Trabajo personal y otras actividades:	7,5
Nivel (2): Bás	ico-Intermedio				
Profesor/es (3)	: Designados por el S	ervicio de Idiom	as de la USAL.		
Lugar de impa	artición: USAL	Fecha (4): 1º C	urso, 1º semestre	Horario: Por determi	nar
Objetivos (5):	Completar o adquirii	la capacidad de	e oral y escrita nece	saria para leer textos	ci entífic

Código: 303	141			
		Créditos de aprendizaje		
Гіро (1): О	Créditos ECTS: 5	Teóricos:	Prácticos:	Trabajo personal y otras actividades:
Nivel (2): Inte	rmedio	-		
Profesor/es (3)	: Fernando Martín (2,	5 ECTS), Manuel	Aguilar (2,5 ECTS)	
Lugar de imp	artición: U. Oviedo	Fecha (4):10 Cu	ırso, 1º semestre	Horario: Por determinar

ASIGNATUR	A: Métodos de Quím	nica cuántica y N	lecánica estadística	
Código: 303	142			
			Créditos de aprendiza	nje
Tipo (1): O	Créditos ECTS: 10	Teóricos:	Prácticos:	Trabajo personal y otras actividades:
Nivel (2): Inte	rmedio	1		
Profesor/es (3)	: Manuel Yáñez (5 ECT	S), Pilar Redon	io (5 ECTS)	
Lugar de impa	artición: U. Oviedo	Fecha (4): 1º C	ırso, 1º semestre	Horario: Por determinar
Objetivos (5): (Consultar la página w	eb oficial del má	ster: http://www.e	emtccm.org/
Object 103 (3). (oonoartar la pagina W	co oncial aci ma	occi incepi//www.c	<u>97</u>

MÓDULO 3: Técnicas (6 ECTS)

ASIGNATURA: Técnicas computacionales y cálculo numérico Código: 303143 Créditos de aprendizaje Tipo (1): **O** Créditos ECTS: 6 Teóricos: Prácticos: Trabajo personal y otras actividades: Nivel (2): Intermedio Profesor/es (3): José Manuel He rmida (1,5 E CTS), Xabie r López (1,5 E CTS), Carmen Bar rientos (1,5 ECTS), Manuel Alcamí (1,5 ECTS) Lugar de impartición: U. Oviedo Fecha (4): 1º curso, 1º semestre Horario: Por determinar Objetivos (5): Consultar la página web oficial del máster: http://www.emtccm.org/

MÓDULO 4: Aplicaciones (9 ECTS)

		Créditos de aprendizaje		
Tipo (1): O	Créditos ECTS: 9	Teóricos:	Prácticos:	Trabajo personal y otras actividades:
Nivel (2): Inte	ermedio			
Profesor/es (3	: Ana Graña (4,5 ECTS	6), Pablo García	(4,5 ECTS)	
Lugar da imn	artición: U. Oviedo	Fecha (4): 10 CI	ırso, 1º semestre	Horario: Por determinar

MÓDULO 5: Optatividad* (entre 15 y 25 ECTS)

*Dependiendo de cuántos créditos haya debido tomar del Módulo 1 el alumno completará con asignaturas de este Módulo hasta sumar 25 ECTS. Las 4 primeras asignaturas corresponden al curso intensivo interuniversitario en España y las 4 últimas se cursarán en la USAL.

ASIGNATURA	A: Dinámica				
Código: 3031	53				
			Créditos de aprendizaje		
Tipo (1): OP	Créditos ECTS: 5	Teóricos:	Prácticos:	Trabajo personal y otras actividades:	
Nivel (2): Inter	medio-Avanzado	,			
Profesor/es (3):	Jesús J. Aldegunde	Carrión (2,5 ECT	S), Antonio Fernáno	dez (2,5 ECTS)	
Lugar de impa	rtición: U. Oviedo	Fecha (4): 1° C	urso, 1º semestre	Horario: Por determinar	
Objetivos (5): C	onsultar la página w	eb oficial del má	ister: <u>http://www.e</u>	emtccm.org/	

		Créditos de aprendizaje		
Tipo (1): OP	Créditos ECTS: 5	Teóricos:	Prácticos:	Trabajo personal y otras actividades:
Nivel (2): Inter	medio-Avanzado			
Profesor/es (3):	Adolfo Bastida (2,5	ECTS), Alejandr	o Toro Labbé (2,5 E	CTS)
Lugar de impa	rtición: U. Oviedo	Fecha (4): 1° C	urso, 1º semestre	Horario: Por determinar

Código: 3031:	55			
			Créditos de aprendizaje	
Гіро (1): ОР	Créditos ECTS: 5	Teóricos:	Prácticos:	Trabajo personal y otras actividades:
Nivel (2): Inte	rmedio-Avanzado			
Profesor/es (3)	Enrique Cabaleiro (2	2,5 ECTS), Dimas	Suárez (2,5 ECTS)	
I do !	rtición: U. Oviedo	Fecha (4): 1º Cu	ırso, 1º semestre	Horario: Por determinar

Tipo (1): OP		Créditos de aprendizaje			
	Créditos ECTS: 5	Teóricos:	Prácticos:	Trabajo personal y otras actividades:	
Nivel (2): Inte	ermedio-Avanzado	•			
Profesor/es (3):	Antonio Márquez (2	,5 ECTS), Víctor	Luaña (2,5 ECTS)		
	rtición: U. Oviedo	E 1 40 40 -	urso, 1º semestre	Horario: Por determinar	

Tipo (1): OP		Créditos de aprendizaje		aje
	Créditos ECTS: 5	Teóricos: 5	Prácticos: 0	Trabajo personal y otras actividades: 7,5
Nivel (2): Inter	medio-Avanzado			
Profesor/es (3):	José Mª Alvariño He	errero		
Lugar de impa	rtición: USAL	Fecha (4): 1º C	urso, 2º semestre	Horario: Por determinar
experimentales. C				omo un sistema fotoquímico. Métodos s de otros planetas. Requisitos previo

			Créditos de aprendiz	aje
Tipo (1): OP	Créditos ECTS: 5	Teóricos:	Prácticos:	Trabajo personal y
		2	4,5	otras actividades: 6
	medio-Avanzado Susana Gómez Carr	asco (2,5 ECTS),	M ^a Dolores Gonzál	ez Sánchez (2,5 ECTS)
Lugar de imna	rtición: USAL	Fecha (4): 1º Cu	ırso, 2º semestre	Horario: Por determinar
Lugar ac impu				

		Créditos de aprendizaje		
Tipo (1): OP	Créditos ECTS: 5	S: 5 Teóricos: Prácticos:	Trabajo personal y	
		3	3	otras actividades: 6,5
Nivel (2): Inter	medio-Avanzado			
Profesor/es (3):	Susana Gómez Carra	asco (2,5 ECTS),	Ma Dolores Gonzál	ez Sánchez (2,5 ECTS)
Lugar da impa	rtición: USAL	Fecha (4): 10 C	urso, 2º semestre	Horario: Por determinar

	: Aspectos espaciale	es en Química				
Código: 303160	l e e e e e e e e e e e e e e e e e e e					
		Créditos de aprendizaje				
Tipo (1): OP	Créditos ECTS: 5	Teóricos:	Prácticos:	Trabajo personal y		
		5	0	otras actividades: 7,5		
Nivel (2): Interr	nedio-Avanzado					
Profesor/es (3): .	Jesús J. Aldegunde (Carrión				
Lugar de impar	tición: USAL	Fecha (4): 1° C	urso, 2º semestre	Horario: Por determinar		
Objetivos (5): C	ontenidos: Momento ang	gular: operadores y f	funciones de onda. Acopl	amiento de dos o más momentos		
angulares. Transfor	rmaciones bajo rotación.	Operadores tensoria	les esféricos: teorema de	Wigner-Eckart. Rotores rígidos.		
Requisitos previos	s recomendados: Requisi	tos generales				

MÓDULO 6: Aspectos avanzados (15 ECTS)

Tipo (1): O			Créditos de aprendizaje		
	Créditos ECTS: 9	Teóricos: 5	Prácticos: 0	Trabajo personal y otras actividades:	
Nivel (2): Ava	nzado				
Profesor/es (3	· Consultar la nágina	web oficial del r	náster: http://www	.emtccm.org/	
	,. consultar la pagina				

ASIGNATURA: Técnicas computacionales a vanzadas de la estructura electrónica y de la materia condensada Código: 303146 Créditos de aprendizaje **Tipo** (1): **O Créditos ECTS: 6** Teóricos: Prácticos: Trabajo personal y otras actividades: Nivel (2): Avanzado Profesor/es (3): Consultar la página web oficial del máster: http://www.emtccm.org/ Lugar de impartición: U. Valencia Fecha (4): 2º curso, 1º semestre Horario: Por determinar Objetivos (5): Consultar la página web oficial del máster: http://www.emtccm.org/

MÓDULO 7: Modelización avanzada y aplicaciones (15 ECTS)

Tipo (1): O		Créditos de aprendizaje		je
	Créditos ECTS: 9	Teóricos:	Prácticos:	Trabajo personal y otras actividades:
Nivel (2): Avai Profesor/es (3)	nzado : Consultar la página	web oficial del r	máster: <u>http://www</u>	.emtccm.org/
Lugar de imp	artición: U. Valencia	Fecha (4): 2° C	urso, 1º semestre	Horario: Por determinar

ASIGNATURA	: Aplicaciones			
Código: 30314	4 7			
			Créditos de aprendiza	nje
Tipo (1): O	Créditos ECTS: 6	Teóricos:	Prácticos:	Trabajo personal y otras actividades:
Nivel (2): Avanz	zado			
Profesor/es (3):	Consultar la página v	web oficial del n	náster: <u>http://www</u>	v.emtccm.org/
Lugar de impai	rtición: U. Valencia	Fecha (4): 2º CU	irso, 1º semestre	Horario: Por determinar
Objetivos (5): C	Consultar la página w	eb oficial del ma	íster: <u>http://www.</u>	emtccm.org/

MÓDULO 8: Tesis de Master

.1
al y
erminar
•

- (1) Obligatoria (O) Optativa (OP)
- (2) Básico, Intermedio, Avanzado o Especialización
- (3) Indicar el nº de créditos ECTS impartido por cada profesor
- (4) Primer semestre, Segundo semestre o Anual
- (5) Prerrequisitos, contenido, lecturas, método de enseñanza, etc.: