



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE MADRID

33423 - MÉTODOS AVANZADOS EN ESTRUCTURA ELECTRÓNICA, DINÁMICA Y MODELIZACIÓN MOLECULAR

Información de la asignatura

Código - Nombre: 33423 - MÉTODOS AVANZADOS EN ESTRUCTURA ELECTRÓNICA, DINÁMICA Y MODELIZACIÓN MOLECULAR

Titulación: 748 - Máster Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelización Computacional
762 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2021)

Centro: 104 - Facultad de Ciencias

Curso Académico: 2021/22

1. Detalles de la asignatura

1.1. Materia

MÉTODOS AVANZADOS EN ESTRUCTURA ELECTRÓNICA, DINÁMICA Y MODELIZACIÓN MOLECULAR

1.2. Carácter

Obligatoria

1.3. Nivel

Máster (MECES 3)

1.4. Curso

2

1.5. Semestre

Anual

1.6. Número de créditos ECTS

12.0

1.7. Idioma

Inglés

1.8. Requisitos previos

no hay.

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	05/07/2021	1/4
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	1/4	

1.9. Recomendaciones

No aplica.

1.10. Requisitos mínimos de asistencia

La asistencia a clases es obligatoria.

1.11. Coordinador/a de la asignatura

Stefano Evangelisti (Universidad Paul Sabatier Toulouse III).

<https://autoservicio.uam.es/paginas-blancas/>

1.12. Competencias y resultados del aprendizaje

1.12.1. Competencias

BÁSICAS Y GENERALES

CG01 - Los estudiantes son capaces de fomentar, en contextos académicos y profesionales, el avance tecnológico y científico dentro de una sociedad basada en el conocimiento y en el respeto a: a) los derechos fundamentales y de igualdad de oportunidades entre hombres y mujeres, b) los principios de igualdad de oportunidades y accesibilidad universal de las personas con discapacidad y c) los valores propios de una cultura de paz y de valores democráticos.

CG04 - Los estudiantes desarrollan un pensamiento y razonamiento crítico y saben comunicarlos de manera igualitaria y no sexista tanto en forma oral como escrita, en su lengua propia y en una lengua extranjera.

CB6 - Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación.

CB7 - Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.

CB8 - Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios.

CB9 - Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades.

CB10 - Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.

TRANSVERSALES

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

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

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

ESPECÍFICAS

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

CE20 - Conoce y evalúa críticamente la aplicabilidad de los métodos avanzados de la Química Cuántica a los sistemas cuasidegenerados, tales como, sistemas con metales de transición o estados excitados (su espectroscopia y reactividad).

CE21 - Conoce las teorías y los métodos de cálculo para el estudio de sólidos y superficies; evaluación crítica de su aplicabilidad a problemas de catálisis, magnetismo, conductividad, etc.

1.12.2. Resultados de aprendizaje

No aplica.

1.12.3. Objetivos de la asignatura

El curso tiene como objetivos:

1. Familiarizar a los estudiantes con las posibilidades que ofrece los métodos Coupled Cluster para el cálculo de una variedad de propiedades moleculares, que representan esencialmente la respuesta del sistema molecular a una perturbación electromagnética.
2. Aprender las bases teóricas de los métodos, proporcionando información sobre el método de onda plana-pseudopotencial y las técnicas de Transformada Rápida de Fourier.

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	05/07/2021	2/4
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	2/4	

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

1.13. Contenidos del programa

Bloque 1 - Métodos avanzados en estructura electrónica.

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

Bloque 2 - Dinámica y modelización molecular.

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

1.14. Referencias de consulta

- F Weinhold, C. R. Landis. Valency and Bonding: A Natural Bond Orbital Donor-Acceptor Perspective. (Cambridge Univ. Press. 2005)
- R. F. W. Bader. Atoms in Molecules. A quantum theory. /Cambridge Univ. Press. 1990).
- B. Silvi, A. Savin, Nature 371, 1994, 683.
- C. Gatti, P. Macchi, Eds. Modern Charge Density Analysis. (Springer 2012).
- Attila Szabo and Neil S. Ostlund, Modern Quantum Chemistry (Macmillan Publishing Co., Inc., 1982).
- Trygve U. Helgaker, Poul Jorgensen, and Jeppe Olsen, Molecular Electronic-Structure Theory (John Wiley & Sons Inc., Chichester, 2000).
- J. Stone "The Theory of Intermolecular Forces", Oxford University Press, 2º Ed. UK. 2013.
- "Computer simulations of liquids", M.P. Allen and D.J. Tildesley, (Oxford Science Publications, 2000).
- D. Marx, and J. Hutter, Ab Initio Molecular Dynamics: Theory and Implementation in Modern Methods and Algorithms of Quantum Chemistry (J. Grotendorst Ed., John von Neumann Institute for Computing, Julich, NIC Series, Vol. 1, pp. 301-449, 2000).

2. Metodologías docentes y tiempo de trabajo del estudiante

2.1. Presencialidad

Porcentaje de actividades presenciales (mínimo 33% del total).

2.2. Relación de actividades formativas

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	05/07/2021	3/4
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	3/4	

Porcentaje de actividades no presenciales.	
Actividades presenciales	Nº horas
Clases teóricas en aula	40
Prácticas con medios informáticos	40
Actividades de evaluación	2

3. Sistemas de evaluación y porcentaje en la calificación final

3.1. Convocatoria ordinaria

La nota final de la asignatura se basará en: 20% examen final de la asignatura y un 80% correspondiente a la entrega de un informe de ejercicios propuestos por el profesor.

3.1.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Examen final	20
Ejercicios propuestos	80

3.2. Convocatoria extraordinaria

La evaluación se basará en la entrega de un informe con los ejercicios propuestos.

3.2.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Ejercicios propuestos.	100
Evaluación continua	0

4. Cronograma orientativo

Cada año, la asignatura estará organizada por una de las universidades del consorcio. Para el curso 2021 - 2022, la encargada será la Universidad Paul Sabatier Toulouse III.

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	05/07/2021	4/4
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	4/4	