



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE MADRID

## 32529 - PROFUNDIZACIÓN EN LOS MÉTODOS DE LA QUÍMICA TEÓRICA

### Información de la asignatura

**Código - Nombre:** 32529 - PROFUNDIZACIÓN EN LOS MÉTODOS DE LA QUÍMICA TEÓRICA

**Titulación:** 616 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2013)  
651 - Máster Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelización Computacional  
748 - Máster Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelización Computacional  
751 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional Europeo  
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

Profundización en los Métodos de la Química Teórica.

#### 1.2. Carácter

Optativa

#### 1.3. Nivel

Máster (MECES 3)

#### 1.4. Curso

1

#### 1.5. Semestre

Anual

#### 1.6. Número de créditos ECTS

5.0

#### 1.7. Idioma

English

#### 1.8. Requisitos previos

No hay.

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

## 1.9. Recomendaciones

No hay.

## 1.10. Requisitos mínimos de asistencia

La asistencia a las clases es obligatoria.

## 1.11. Coordinador/a de la asignatura

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

## 1.12. Competencias y resultados del aprendizaje

### 1.12.1. Competencias

#### BÁSICAS Y GENERALES:

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.

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

CG02 - Los estudiantes son capaces de resolver problemas y tomar decisiones de cualquier índole bajo el compromiso con la defensa y práctica de las políticas de igualdad.

#### TRANSVERSALES:

CT02 - El/la estudiante es organizado en el trabajo demostrando que sabe gestionar el tiempo y los recursos de que dispone.

#### ESPECÍFICAS:

CE01 - Los estudiantes demuestran su conocimiento y comprensión de los hechos aplicando conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química Teórica y Modelización Computacional.

CE04 - Comprende los fundamentos teóricos y prácticos de técnicas computacionales con las que puede analizar la estructura electrónica, morfológica y estructural de un compuesto e interpreta adecuadamente los resultados.

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

CE16 - El/la estudiante es capaz de discernir entre los diferentes métodos existentes y cómo seleccionar el más adecuado para cada problema.

### 1.12.2. Resultados de aprendizaje

El objeto del presente curso es proporcionar a los estudiantes una visión más profunda de los métodos empleados en Química teórica, haciendo especial hincapié en que los estudiantes profundicen en los siguientes aspectos:

- Conocimiento de la problemática específica de los métodos mecanocuánticos aplicados a sistemas de gran tamaño.
- comprensión y capacidad de discriminación entre distintos métodos analíticos útiles para resolver integrales moleculares monoeléctricas y bielectrónicas según la naturaleza de dichas integrales.
- Comprensión de las características esenciales de los métodos numéricos utilizados para resolver integrales moleculares. Como consecuencia, capacidad para modificar parámetros propios de cada método para resolver problemas prácticos y para escoger el método más adecuado a un problema concreto.
- Conocimiento detallado de algunos métodos que aceleran el proceso de resolución de ecuaciones autoconsistentes.
- Conocimiento de los fundamentos de los métodos locales para evaluar la energía de correlación.
- Conocimiento detallado de las bases metodológicas de los métodos más comunes.
- Capacidad para estimar coste computacional y escalado
- Estimación de la magnitud de los errores asociados
- Capacidad para determinar su posibilidad de aplicación a un problema concreto.
- Teoría del funcional de la densidad: matemática avanzada, funcionales y conceptos recientes.

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

- Retos y perspectivas de la teoría del funcional de la densidad.

### 1.12.3. Objetivos de la asignatura

-

### 1.13. Contenidos del programa

- Integrales moleculares monoeléctricas. Propiedades y técnicas de cálculo analíticas y numéricas.
- Integrales moleculares bielectrónicas. Screening, métodos directos, técnicas de descomposición. Métodos pseudoespectrales. Aplicación del desarrollo multipolar.
- Ecuaciones SCF. Convergencia. Métodos adaptados a matrices dispersas.
- Eficiencia y escalado de los métodos. Coste computacional.
- Introducción a la correlación electrónica.
- Métodos basados en la función de onda:
  - Interacción de configuraciones
  - Coupled Cluster
  - Teoría de Perturbaciones. Métodos MPn
  - Métodos multireferenciales
- Bases para el cálculo de la energía de correlación.
- Introducción a los métodos explícitamente correlacionados.
- Métodos locales de correlación electrónica.
- Sistemas Intermoleculares. Métodos de partición de la energía de interacción.
- Teoría del Funcional de la Densidad (DFT)
  - Desarrollo de funcionales de intercambio-correlación: LDA, GGA, híbridos e ideas recientes -Condiciones exactas, conexión adiabática y otras aproximaciones
  - Autoenergías Kohn-Sham y el método OEP
  - Extensión a sistemas con un número no entero de partículas y espín: error de deslocalización electrónica y error de correlación estática
  - DFT dependiente del tiempo: respuesta lineal y propagación explícita en el tiempo
  - Grandes retos de las aproximaciones más populares en DFT: sistemas fuertemente correlacionados
  - El funcional exacto de DFT

### 1.14. Referencias de consulta

- F. Jensen, Introduction to Computational Chemistry, John Wiley & Sons, Chichester, 1999
- D. B. Cook, Handbook of Computational Quantum Chemistry, Oxford University Press, Oxford, 1998
- A. Szabo and N. S. Ostlund, Modern Quantum Chemistry, Dover publications Mineola, 1996
- T. Helgaker and P. R. Taylor, Gaussian basis sets and molecular integrals, World Scientific, Singapore, 1995
- D. R. Yarkony (Ed.) Direct Methods in Electronic Structure Theory, Vol. part I, World Scientific, Sinapore, 1995
- Helgaker, T., Jørgensen, P., Olsen, J.; Molecular Electronic-Structure Theory. John Wiley & Sons Ltd, 2000.
- Roos, B. Editor; Lecture notes in quantum chemistry: European summer school in quantum chemistry. Springer-Verlag 1994. Chapters on CC, CI, MCSCF, calibration.
- Robert G. Parr and Weitao Yang: Density Functional Theory for Atoms and Molecules. Oxford University Press, 1994.
- A. J. Cohen, P. Mori-Sánchez and W. Yang, Challenges for Density Functional Theory, Chemical Reviews, 112, 208 (2012).
- Dreizler and Gross, Density Functional Theory: An approach to the quantum many-body problem, Springer-Verlag (1990)
- Axel Becke, Perspective: Fifty years of density-functional theory in chemical physics J. Chem. Phys. 140, 18A301 (2014)

## 2. Metodologías docentes y tiempo de trabajo del estudiante

### 2.1. Presencialidad

	#horas
Porcentaje de actividades presenciales (mínimo 33% del total)	35
Porcentaje de actividades no presenciales	90

### 2.2. Relación de actividades formativas

Actividades presenciales	Nº horas
Clases teóricas en aula	20
Seminarios	15
Clases prácticas en aula	

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

Prácticas clínicas	
Prácticas con medios informáticos	
Prácticas de campo	
Prácticas de laboratorio	
Prácticas externas y/o practicum	
Trabajos académicamente dirigidos	
Tutorías	
Actividades de evaluación	
Otras	

**Lección Magistral:** El profesor expondrá los contenidos del curso en sesiones presenciales, o, por video conferencia de dos horas basándose en los materiales docentes publicados en la plataforma Moodle.

**Docencia en red.** Se utilizará las distintas herramientas que ofrece la plataforma Moodle (<https://posgrado.uam.es>).  
Publicación de contenidos de la asignatura, herramientas de trabajo en grupo: foros de discusión y wiki, correo electrónico

**Tutorías.** El profesor realizará tutorías individuales o con grupos reducidos sobre cuestiones puntuales que los estudiantes puedan plantear.

**Seminarios online.** Con posterioridad a las clases expositivas, se realizarán seminarios online para discutir los resultados obtenidos en los trabajos propuestos, las dudas sobre las metodologías empleadas, y supervisar la preparación de los informes elaborados por los estudiantes.

### 3. Sistemas de evaluación y porcentaje en la calificación final

#### 3.1. Convocatoria ordinaria

El aprendizaje y la formación adquirida por el estudiante serán evaluados a lo largo de todo el curso, intentando que el estudiante avance de forma regular y constante en la asimilación de los contenidos de la asignatura. La nota final de la asignatura se basará en los ejercicios, trabajos y discusión de los mismos que se irá realizando durante el curso. Dichos trabajos se puntuarán en base a los siguientes porcentajes:

- 90 % la memoria presentada por el estudiante,
- 10 % la discusión que sobre la misma se realice con el profesor en tutorías y seminarios.

##### 3.1.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Examen final (máximo 70% de la calificación final o el porcentaje que figure en la memoria)	
Evaluación continua	

#### 3.2. Convocatoria extraordinaria

Se evaluarán los contenidos suspensos en la convocatoria ordinaria por medio de trabajos centrados en dichos contenidos, que el alumno realizará de forma personal en un plazo fijado.

##### 3.2.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Examen final (máximo 70% de la calificación final o el porcentaje que figure en la memoria)	
Evaluación continua	

### 4. Cronograma orientativo

Por favor, comprobar el horario oficial publicado en la página web del Máster.

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