



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:** 2024/25

### 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

616-Anual o Primer semestre  
762-Anual o Primer semestre  
651-Anual o Primer semestre  
748-Anual o Primer semestre  
621-Anual  
685-Anual  
751-Anual o Primer semestre

#### 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>	08/07/2024	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

Marcos Mandado Alonso - Universidad de Vigo

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

## 1.12. Competencias y resultados del aprendizaje

### 1.12.1. Competencias / Resultados del proceso de formación y aprendizaje

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

### 1.12.3. Objetivos de la asignatura

-

<b>Código Seguro de Verificación:</b>		<b>Fecha:</b>	08/07/2024	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	

### 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, Singapore, 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	
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	

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	08/07/2024	3/4
Firmado por:	Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas			
Url de Verificación:		Página:	3/4	

**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 comprende resolución de ejercicios (en un total del 60%), informe de ejercicios y trabajos (30%) que se entregarán en conjunto con una parte de los ejercicios, y discusión sobre los mismos (10%).

El 50% de la nota final de la asignatura se basará en la resolución de ejercicios relacionados con los vistos en clase, a modo de examen de carácter teórico que abarcará los contenidos de toda la asignatura. Del 50% restante, de los ejercicios, trabajos y discusión de los mismos que realizará el estudiante. Dichos trabajos se puntuarán en base a los siguientes porcentajes:

- (40% de la nota total) que el estudiante presentará contenido en una memoria (que contendrá aspectos de todos los temas tratados en la asignatura), con porcentajes:
  - 10% de la nota total: ejercicios contenidos en el informe/memoria
  - 30% de la nota total: trabajo de las clases prácticas, contenido en el informe/memoria
  - 10% discusión de ejercicios y memoria que se realice con los profesores en tutorías y seminarios.

##### 3.1.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Ejercicios relacionados con la asignatura a modo de examen final (máximo 70% de la calificación final o el porcentaje que figure en la memoria)	50
Evaluación continua: ejercicios con contenidos de asignaturas- a entregar con el informe/memoria	
	10
	Total 60
Evaluación continua: informe/memoria prácticas realizadas con un trabajo detallado	30
Participación en las clases: discusión sobre la memoria y ejercicios realizados	10

#### 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.

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	08/07/2024	4/4
Firmado por:	Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas			
Url de Verificación:		Página:	4/4	