



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE MADRID

31246 - ESTADOS EXCITADOS

Información de la asignatura

Código - Nombre: 31246 - ESTADOS EXCITADOS

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

Estados Excitados.

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.

1.9. Recomendaciones

No hay.

1.10. Requisitos mínimos de asistencia

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	08/07/2024	1/5
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	1/5	

La asistencia a las clases es obligatoria.

1.11. Coordinador/a de la asignatura

Javier Cerezo Bastida -Universidad Autónoma de Madrid.

<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.

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.

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.

TRANSVERSALES:

CT03 - El/la estudiante posee capacidad de análisis y síntesis de tal forma que pueda comprender, interpretar y evaluar la información relevante asumiendo con responsabilidad su propio aprendizaje o, en el futuro, la identificación de salidas profesionales y yacimientos de empleo.

ESPECÍFICAS:

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.

CE27 - Los estudiantes conocen los fundamentos de los métodos utilizados para el tratamiento de estados excitados y son capaces de manejar los programas de uso más frecuente para el tratamiento de estados excitados.

1.12.2. Resultados de aprendizaje

El curso pretende familiarizar a los estudiantes con el tratamiento de estados excitados, tanto rovibracionales como electrónicos. Al final del curso el estudiante conocerá los fundamentos de los métodos y será capaz de manejar los programas de uso más frecuente para el tratamiento de estados excitados.

1.12.3. Objetivos de la asignatura

-

1.13. Contenidos del programa

1. Funciones de energía potencial nuclear

- Aproximación de Born-Oppenheimer
- Curvas de energía potencial de moléculas diatómicas
- Superficies de energía potencial de moléculas poliatómicas

2. Interacción de la radiación y la materia

- Modelo clásico de la radiación electromagnética
- Probabilidad de transición inducida por la radiación

3. Espectros rovibracionales:

- Moléculas diatómicas: niveles de energía y reglas de selección
- Espectros rotacionales puros y rovibracionales en diatómicas.
- Moléculas poliatómicas: vibraciones clásicas y vibraciones cuánticas.
- Espectros rovibracionales en poliatómicas.
- Relajación vibracional en líquidos: métodos experimentales y tratamientos teóricos

4. Conceptos básicos en Fotoquímica Molecular

- Absorción de luz: (Radiación electromagnética, la ley de Lambert-Beer, Espectros de absorción, principio de Franck-

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	08/07/2024	2/5
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	2/5	

Condon, Momento dipolar de transición, Oscilador armónico clásico y su versión mecánico cuántica, Reglas de Selección, Transiciones electrónicas)

- Desactivación de los estados excitados: (Transferencia de energía y electrónica, Diagramas de Jablonski, Relajación vibracional, Transiciones radiativas y no radiativas, principio Franck-Condon para transiciones no radiativas, Ley de la diferencia de energía, Escalas de tiempo y rendimientos cuánticos, Ley de oro de Fermi)
- Superficies de energía potencial excitadas: (cruces entre superficies, caminos de reacción fotoquímicos, ejemplos).

5. Cálculos químico-cuánticos de estados excitados: Métodos multiconfiguracionales.

- *Correlación electrónica en moléculas.*
- *Métodos de estructura electrónica para el cálculo de estados excitados. Métodos monoconfiguracionales vs multiconfiguracionales. Métodos CASSCF, RASSCF y más avanzados (DMRG, FCIQMC, HCI). Selección del espacio activo. Cálculos single state vs. state-average. average. Consideraciones a la hora de elegir un conjunto de funciones de base.*
- *Introducción de correlación dinámica: el método CASPT2.*
- *Método CASPT2 problemas y soluciones: estados intrusos, cruces evitados y mezcla Rydberg-valencia. El método Level shift y MS-CASPT2. Otras mejoras de CASPT2: IPEA, XDW. Comparativa de CASPT2 frente NEVPT2.*
- *Ejemplos.*

6. Cálculos químico-cuánticos de estados excitados: aplicaciones de métodos TD-DFT.

- *Evaluación de superficies de energía potencial de estados excitados.*
- *Cálculo de espectros electrónicos y transiciones no radiactivas.*

7. Simulaciones dinámicas: Propagación de paquetes de onda.

- Operador de evolución temporal, Propagación, Método de relajación, Método de filtrado. Interacción con un campo eléctrico. Funciones de correlación. Espectros y autofunciones. Espectroscopía bombeo-sonda y control.

8. Dinámicas ultrarrápidas con TD-DFT.

- Dinámica molecular ab initio: Dinámicas Born-Oppenheimer y Ehrenfest. Dinámicas no adiabáticas, *Tully's surface hopping*. Ejemplos de dinámicas moleculares ab initio no adiabáticas. Incorporación de efectos del entorno: campos electromagnéticos y disolvente.

1.14. Referencias de consulta

- A. Requena y J. Zúñiga, Espectroscopía (Pearson Education, Madrid, 2004).
- P.F. Bernath, Spectra of Atoms and Molecules (Oxford University Press, Nueva York, 1995).
- J. L. McHale, Molecular Spectroscopy (Prentice Hall, New Jersey, 1999).
- J. I. Steinfeld, Molecules and Radiation (The MIT Press, Cambridge, 1989).
- W. S. Struve, Fundamentals of Molecular Spectroscopy (Wiley, Nueva York, 1989).
- S. Svanberg, Atomic and Molecular Spectroscopy (Springer-Verlag, Berlín, 2001).
- J. M. Hollas, Modern Spectroscopy (Wiley, Chichester, 1996).
- I. N. Levine, Molecular Spectroscopy (Wiley, 1980)
- C.A. Ullrich, Time-Dependent Density-Functional Theory: Concepts and Applications (Oxford University Press, USA, 2012).
- D. Marx and J. Hutter, Ab Initio Molecular Dynamics: Basic Theory and Advanced Methods, 1st ed. (Cambridge University Press, Cambridge, 2009).
- D.J. Tannor, Introduction to Quantum Mechanics: A Time-Dependent Perspective (University Science Books, 2006).
- edited by M.A.L. Marques, C.A. Ullrich, F. Nogueira, A. Rubio, K. Burke, and E.K.U. Gross, Time-Dependent Density Functional Theory, 1st ed. (Springer, 2006).
- M.A.L. Marques and E.K.U. Gross, Annual Review of Physical Chemistry 55, 427-455 (2004).
- P.W. Brumer and M. Shapiro, Principles of the Quantum Control of Molecular Processes, illustrated ed. (Wiley-Interscience, 2003).
- L. Serrano-Andrés and M. Merchán, Spectroscopy: Applications in Encyclopedia of Computational Chemistry (John Wiley & Sons, Ltd, 2004).
- S.A. Rice and M. Zhao, Optical Control of Molecular Dynamics, 1st ed. (Wiley-Interscience, 2000).
- edited by B.O. Roos, Lecture Notes in Quantum Chemistry II: European Summer School in Quantum Chemistry, 1st ed. (Springer-Verlag, 1994).
- E.K.U. Gross, J.F. Dobson and M. Petersilka, in Density Functional Theory II, edited by R. Nalewajski (Springer Berlin / Heidelberg, 1996), pp. 81-172.
- N.J. Turro, Modern Molecular Photochemistry (University Science Books, Mill Valley, California, 1991).
- B.O. Roos, Ab initio methods in quantum chemistry II in Advances in Chemical Physics, edited by K. P. Lawley (John Wiley & Sons, Inc., 1987), pp. 399-445.
- edited by M. Olivucci, Computational Photochemistry (Elsevier, Amsterdam, 2005)

2. Metodologías docentes y tiempo de trabajo del estudiante

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	08/07/2024	3/5
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	3/5	

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	35
Seminarios	
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	

Lección Magistral: El profesor expondrá los contenidos del curso en sesiones presenciales 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

Los conocimientos adquiridos 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:

- 60 % Realización de un trabajo propuesto.
- 40 % Discusión de la materia durante las prácticas, incluyendo una pequeña prueba escrita (10%).

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)	10
Evaluación continua	90

3.2. Convocatoria extraordinaria

Se realizará un examen final único que será de carácter teórico y que abarcará los contenidos de toda la asignatura. La puntuación en la convocatoria extraordinaria se realizará en base a los siguientes porcentajes:

- 80 % la realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura.
- 20% el examen final.

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)	20

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	08/07/2024	4/5
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	4/5	

4. Cronograma orientativo

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

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	08/07/2024	5/5
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	5/5	