

**FICHA IDENTIFICATIVA****Datos de la Asignatura**

<b>Código</b>	43992
<b>Nombre</b>	Métodos de la química teórica I
<b>Ciclo</b>	Máster
<b>Créditos ECTS</b>	5.0
<b>Curso académico</b>	2022 - 2023

**Titulación(es)**

Titulación	Centro	Curso	Periodo
2184 - M.U. en Química Teórica y Modelización Computacional 13-V.1	Facultad de Química	1	Anual
3156 - Química Teórica y Modelización Computacional	Escuela de Doctorado	0	Primer cuatrimestre

**Materias**

Titulación	Materia	Caracter
2184 - M.U. en Química Teórica y Modelización Computacional 13-V.1	2 - Métodos	Obligatoria
3156 - Química Teórica y Modelización Computacional	1 - Complementos de Formación	Optativa

**Coordinación**

Nombre	Departamento
SANCHEZ MARIN, JOSE	315 - Química Física

**RESUMEN****CONOCIMIENTOS PREVIOS****Relación con otras asignaturas de la misma titulación**

No se han especificado restricciones de matrícula con otras asignaturas del plan de estudios.



### Otros tipos de requisitos

No hay requisitos previos.

## COMPETENCIAS

### 2184 - M.U. en Química Teórica y Modelización Computacional 13-V.1

- Que los/las 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.
- Que los/las 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.
- Que los/las 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.
- Que los/las estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo
- 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.
- Los estudiantes deben ser 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.
- El estudiante es capaz de adaptarse a diferentes entornos culturales.
- El estudiante es capaz de resolver problemas y tomar decisiones.
- El estudiante demuestra su conocimiento y comprensión de los hechos aplicando conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química Teórica y Modelización Computacional.
- Comprender los fundamentos teóricos y prácticos de técnicas con las que puede analizar la estructura electrónica, morfológica y estructural de un compuesto.
- El estudiante entiende los principios básicos de las metodologías "ab initio" y Teoría de los Funcionales de la Densidad.
- El estudiante es capaz de discernir entre los diferentes métodos existentes y cómo seleccionar el más adecuado para cada problema.



## RESULTADOS DE APRENDIZAJE

Después de cursar la asignatura los alumnos deberán estar en capacidad de:

- Comprender 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.
- Entender los principios básicos de las metodologías "ab initio" y Teoría de los Funcionales de la Densidad.
- Discernir entre los diferentes métodos existentes y cómo seleccionar el más adecuado para cada problema.
- Demostrar su conocimiento y comprensión de los hechos aplicando conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química Teórica y Modelización Computacional.

## DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS

### 1. Métodos Ab-initio

- Método de Hartree-Fock: RHF y UHF
- Funciones de base, pseudopotenciales y potenciales efectivos.
- Visión general de métodos no perturbacionales basados en función de onda: Métodos de interacción de configuraciones y Métodos Multiconfiguracionales.
- Teoría de perturbaciones Moller-Plesset.
- Introducción a los métodos Coupled Cluster

En la parte de Métodos de la Química Cuántica se cubre los teoremas fundamentales en los que se basan los métodos y la formulación de los principales métodos "ab initio".

### 2. Teoría del Funcional de la Densidad

- Conceptos preliminares. Teoremas de Hohenberg-Kohn.
- Método de Kohn-Sham.
- Aproximaciones al potencial de intercambio-correlación (DFAs)

En el apartado correspondiente a la Teoría del Funcional de la Densidad se pretende que el alumno entienda los principios básicos de la teoría y comprenda cómo se desarrollan los principales tipos de funcionales de intercambio-correlación y sus características. El alumno debe ser capaz de discernir entre los diferentes métodos existentes cómo seleccionar el más adecuado para cada problema.



## VOLUMEN DE TRABAJO

ACTIVIDAD	Horas	% Presencial
Clases de teoría	20,00	100
Seminarios	15,00	100
Elaboración de trabajos individuales	30,00	0
Estudio y trabajo autónomo	40,00	0
Preparación de clases prácticas y de problemas	20,00	0
<b>TOTAL</b>	<b>125,00</b>	

## METODOLOGÍA DOCENTE

**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 (<http://www.uam.es/moodle>). 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.

## EVALUACIÓN

### 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:

- 70 % Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura,
- 30 % la discusión que sobre la misma se realice con el profesor en tutorías y seminarios.

**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:

- 70% el examen final,
- 30 % Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura.

**REFERENCIAS****Básicas**

- Helgaker, T., Jørgensen, P., Olsen, J.; Molecular Electronic-Structure Theory. John Wiley & Sons Ltd, 2000.
- Szabo, A., Ostlund, N. S.; Modern Quantum Chemistry. Introduction to Advanced Electronic Structure Theory. McGraw-Hill, 1989
- Roos, B. Editor; Lecture notes in quantum chemistry: European summer school in quantum chemistry. Springer-Verlag 1994. Chapters on CC, CI, MCSCF, calibration.
- Linear-Scaling Techniques in Computational Chemistry and Physics. Zaleny, R.; Papadopoulos, M.G.; Mezey, P.G.; Leszczynski, J. (Eds.). Springer (Berlin) 2011.
- A Chemist's Guide to Density Functional Theory. W. Koch and M.C. Holthausen, Wiley-VCH, 2001
- Density-Functional Theory of Atoms and Molecules. R.G. Parr and W. Yang, Oxford University Press, New York, 1989
- Electronic Structure. R.M. Martin, Cambridge University Press, Cambridge, 2004