

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

<b>Código</b>	43995
<b>Nombre</b>	Teoría avanzada de la estructura electrónica y de la materia condensada
<b>Ciclo</b>	Máster
<b>Créditos ECTS</b>	9.0
<b>Curso académico</b>	2022 - 2023

**Titulación(es)**

<b>Titulación</b>	<b>Centro</b>	<b>Curso</b>	<b>Periodo</b>
2184 - M.U. en Química Teórica y Modelización Computacional 13-V.1	Facultad de Química	2	Anual

**Materias**

<b>Titulación</b>	<b>Materia</b>	<b>Caracter</b>
2184 - M.U. en Química Teórica y Modelización Computacional 13-V.1	3 - Aspectos avanzados	Obligatoria

**Coordinación**

<b>Nombre</b>	<b>Departamento</b>
SANCHEZ MARIN, JOSE	315 - Química Física
TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO	315 - Química Física

**RESUMEN**

La edición número 12 del Curso Intensivo del Máster en Química Teórica y Modelización Computacional tendrá lugar en la Universidad de Valencia del 4 de septiembre al 30 de septiembre de 2017.

Web: <http://www.icmol.es/EMTCCM2017/>

**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 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.
- Conocimiento de una lengua extranjera
- 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.
- Conocer y evaluar 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).
- Conocer 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.
- Conocer la existencia de técnicas computacionales avanzadas tales como: canalización de instrucciones y datos, procesadores superescalar y multiescalares, operaciones en cadena, plataformas en paralelo, etc.

### 2193 - M.ErasmMund en Química Teórica y Modelización Computacional

- 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 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.
- Conocer y evaluar 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).
- Conocer 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.
- Conocer la existencia de técnicas computacionales avanzadas tales como: canalización de instrucciones y datos, procesadores superescalar y multiescalares, operaciones en cadena, plataformas en paralelo, etc.

## RESULTADOS DE APRENDIZAJE

-- Familiarizar a los estudiantes con las posibilidades que ofrece el clúster para el cálculo de una variedad de propiedades moleculares, que representan esencialmente la respuesta del sistema molecular a una perturbación electromagnética-- Aprender las bases teóricas de los métodos, proporcionando información sobre el método de onda plana-pseudopotencial y las técnicas de Transformada Rápida de Fourier -- Cálculo, utilizando métodos DFT, de propiedades moleculares de sistemas grandes, tanto para moléculas como para materiales -- 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-- Introducir la teoría de Valence Bond (VB) -- Aprender a interpretar los resultados de diferentes cálculos de Valence Bond utilizando diferentes modelos orbitales -- Aprender herramientas teóricas y computacionales para resolver la Dinámica Molecular Cuántica en Espectroscopía Vibracional Nuclear

## DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS

### 1. 1. Teoría avanzada de la estructura electrónica

- Introducción a la química computacional: teoría funcional de densidad para optimizaciones de geometría y enfoque de clúster acoplado para energías.
- Teoría avanzada de la estructura electrónica relacionada con los métodos post Hartree-Fock Estados electrónicos emocionados.
- Introducción a Valence Bond Theory.
- Dinámica cuántica para la espectroscopía vibracional nuclear
- Determinación de propiedades moleculares en el enfoque de clúster acoplado
- Química cuántica relativista



-- Modelado de sistemas moleculares grandes con conjuntos de bases de ondas planas

## VOLUMEN DE TRABAJO

ACTIVIDAD	Horas	% Presencial
Clases de teoría	56,00	100
Seminarios	8,00	100
<b>TOTAL</b>	<b>64,00</b>	

## METODOLOGÍA DOCENTE

**Lección magistral:** El profesor expondrá los contenidos del curso en sesiones presenciales.

**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

**Seminarios.** En ellos se discutirán los resultados obtenidos en los trabajos propuestos, las dudas sobre las metodologías empleadas, y supervisar la preparación de los informes elaborados por los estudiantes.

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

## EVALUACIÓN

La nota final de la asignatura se basará en

- 60% realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura.
- 40% discusión en tutorías y/o seminarios sobre los ejercicios, trabajos o prácticas realizados en la asignatura.

## REFERENCIAS



### Básicas

- [1] Introduction to quantum mechanics, David J. Tannor, University Science Books (2007)
- [2] A method for solving the molecular Schrödinger equation in Cartesian coordinates via angular momentum projection operators. J. Suarez, S. Stamatiadis, L. Lathouwers, S.C. Farantos, Comp. Phys. Comm. 180, p225 (2009)
- [3] Quantum Molecular Dynamics on Grids, R. Kosloff, Dynamics of Molecules and Chemical Reactions (editors R. E. Wyatt and J. Z. H. Zhang ), CRC Press (1996)