FICHA IDENTIFICATIVA

Datos de la Asignatura

Código	43999
Nombre	Profundización en los métodos de la química teórica
Ciclo	Máster
Créditos ECTS	5.0
Curso académico	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

Materias

Titulación	Materia	Caracter
2184 - M.U. en Química Teórica y Modelización Computacional 13-V.1	5 - Optatividad	Optativa

Coordinación

Nombre	Departamento
SANCHEZ MARIN, JOSE	315 - Química Física
TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO	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 prerequisitos

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 es organizado en el trabajo y sabe gestionar el tiempo.
- 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

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 monoelectrónicas 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.

DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS

1. Temas:

- Integrales moleculares monoelectrónicas. 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
-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

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
TOTAL	**125,00**	

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

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.

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.

REFERENCIAS

Básicas

- 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 Sientific, 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)