

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

Código	44001
Nombre	Estados Excitados
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 pre-requisitos



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 posee capacidad de análisis y síntesis.
- Comprender los fundamentos teóricos y prácticos de técnicas con las que puede analizar la estructura electrónica, morfológica y estructural de un compuesto.

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 utilizados para el tratamiento de estados excitados y será capaz de manejar los programas de uso más frecuente para el tratamiento de estados excitados.

DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS



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-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 y RASSCF. Selección del espacio activo. Cálculos single state vs. state-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

Ejemplos.

**6. Cálculos químico cuánticos de estados excitados: Métodos TD-DFT.**

DFT, teoremas de Runge-Gross, TDDFT en el régimen de respuesta lineal, propagación de la densidad electrónica.

Cálculo de espectros, aproximación de los funcionales xc.

Ejemplos.

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.

VOLUMEN DE TRABAJO

ACTIVIDAD	Horas	% Presencial
Clases de teoría	35,00	100
Elaboración de trabajos individuales	40,00	0
Estudio y trabajo autónomo	50,00	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

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%).

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.

REFERENCIAS

Básicas

- 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).