



Asignatura: Teoría Avanzada de la Estructura Electrónica y la de la Materia Condensada
Código: 31235
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 9 ECTS

1. ASIGNATURA / COURSE TITLE

Teoría Avanzada de la Estructura Electrónica y de la Materia Condensada / [Advanced Electronic Structure and Condensed Matter Theory](#)

1.1. Código / Course number

31235

1.2. Materia / Content area

Módulo 4. Aspectos avanzados / [Module 4. Advanced aspects](#)

1.3. Tipo / Course type

Obligatoria / [Compulsory subject](#)

1.4. Nivel / Course level

Máster / [Master](#)

1.5. Curso / Year

2º / [2nd](#)

1.6. Semestre / Semester

1º / [1st](#)

1.7. Número de créditos / Credit allotment

9 créditos ECTS / [9 ECTS credits](#)

1.8. Requisitos previos / Prerequisites

No hay requisitos previos / [There are no previous prerequisites](#)



Asignatura: Teoría Avanzada de la Estructura Electrónica y la de la Materia Condensada
Código: 31235
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 9 ECTS

1.9. Requisitos mínimos de asistencia a las sesiones presenciales / **Minimum attendance requirement**

La asistencia a las clases es obligatoria / [Attendance is mandatory](#)

1.10. Datos del equipo docente / **Faculty data**

Docente(s) / [Lecturer\(s\)](#): Marzio Rosi
Universidad de Perugia / [University of Perugia](#)

Docente(s) / [Lecturer\(s\)](#): Coen de Graaf
Universidad de Groninga / [University of Groningen](#)

Docente(s) / [Lecturer\(s\)](#): Remco Havenith
Universidad de Groninga / [University of Groningen](#)

Docente(s) / [Lecturer\(s\)](#): Jaime Suarez
Universidad de Milán / [University of Milan](#)

Docente(s) / [Lecturer\(s\)](#): Alfredo Sánchez
Universidad de Valencia / [University of Valencia](#)

Docente(s) / [Lecturer\(s\)](#): Inmaculada Cuesta
Universidad de Valencia / [University of Valencia](#)

Docente(s) / [Lecturer\(s\)](#): Leonardo Belpassi
Institute of Molecular Science and Technologies (ISTM-CNR)

Docente(s) / [Lecturer\(s\)](#): Ivan Carnimeo
International School for Advanced Studies

1.11. Objetivos del curso / **Course objectives**

1.11a. Resultados del 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



Asignatura: Teoría Avanzada de la Estructura Electrónica y la de la Materia Condensada
Código: 31235
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 9 ECTS

-- 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

1.11b. Competencias

Estos resultados del aprendizaje contribuyen a la adquisición de las siguientes competencias del curso:

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.

CB8 - Que los 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.

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.



Asignatura: Teoría Avanzada de la Estructura Electrónica y la de la Materia Condensada
Código: 31235
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 9 ECTS

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

CT01 - El/la estudiante es capaz de adaptarse a diferentes entornos culturales demostrando que responde al cambio con flexibilidad.

ESPECÍFICAS

CE20 - Conoce y evalúa 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).

CE21 - Conoce 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.

1.11a. Learning objectives

-- To familiarize the students with the possibilities that coupled cluster offers for the computation of a variety of molecular properties, which essentially represent the answer of the molecular system to an electromagnetic perturbation

-- To learn the theoretical basis of the methods, providing insights about the plane wave-pseudo potential method and Fast Fourier Transform techniques.

-- To calculate, using DFT methods, of molecular properties of large systems, both for molecules and materials

--To obtain a theoretical description of the electronic structure that can be used to interpret experimental data, predict interesting phenomena and/or develop new theoretical concepts

-- To introduce to Valence Bond (VB) theory

-- To learn how to interpret the results of different Valence Bond calculations using different orbital models

-- To learn theoretical and computational tools for solving the Quantum Molecular Dynamics in Nuclear Vibrational Spectroscopy



Asignatura: Teoría Avanzada de la Estructura Electrónica y la de la Materia Condensada
Código: 31235
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 9 ECTS

1.11b. Skills

These learning objectives contribute to provide the following skills for the students:

BASIC AND GENERAL SKILLS

CB6 - Students possess and understand knowledge that provides a basis or opportunity to be original in the development and/or application of ideas, often in a research context.

CB7 - Students know how to apply the acquired knowledge and their problem solving capacity in new or little known environments within broader (or multidisciplinary) contexts related to their area of study.

CB8 - Students are able to integrate knowledge and face the complexity of making judgments from information that, incomplete or limited, includes reflections on social and ethical responsibilities linked to the application of their knowledge and judgments.

CB9 - Students know how to communicate their conclusions and the knowledge and reasons that support them to specialized and non-specialized audiences in a clear and unambiguous way.

CB10 - Students possess the learning skills that allow them to continue studying in a way that will be self-directed or autonomous.

CG01 - Students are able to foster, in academic and professional contexts, technological and scientific progress within a society based on knowledge and respect for: a) fundamental rights and equal opportunities between men and women, b) The principles of equal opportunities and universal accessibility for persons with disabilities, and c) the values of a culture of peace and democratic values.

CG04 - Students develop a critical thinking and reasoning and know how to communicate them in an egalitarian and non-sexist way both in oral and written form, in their own language and in a foreign language.

CROSS-COMPREHENSIVE SKILLS

CT01 - Students are able to adapt their selves to different cultural environments by demonstrating that they are able to respond to change with flexibility.

SPECIFIC SKILLS

CE20 - Students know and critically evaluate the applicability of advanced methods of quantum chemistry to quasi-generated systems, such as systems with transition metals or excited states (their spectroscopy and reactivity).

CE21 - Students know the theories and calculation methods for the study of solids and surfaces. Critical evaluation of its applicability to problems of catalysis, magnetism, conductivity, etc.



Asignatura: Teoría Avanzada de la Estructura Electrónica y la de la Materia Condensada
Código: 31235
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 9 ECTS

1.12. Contenidos del programa / **Course contents**

- 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

- Introduction to computational chemistry: density functional theory for geometry optimizations and coupled cluster approach for energies.
- Advanced electron structure theory related with the post Hartree-Fock methods Electronic Excited States.
- Introduction to Valence Bond Theory.
- Quantum dynamics for Nuclear Vibrational Spectroscopy.
- Determination of molecular properties in the coupled cluster approach.
- Relativistic quantum chemistry.
- Modelling large molecular systems with plane waves basis sets.

1.13. Referencias de consulta / **Course bibliography**

- [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)



Asignatura: Teoría Avanzada de la Estructura Electrónica y la de la Materia Condensada
 Código: 31235
 Centro: Facultad de Ciencias
 Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
 Nivel: Máster
 Tipo: Formación Obligatoria
 N° de créditos: 9 ECTS

2. Métodos docentes / Teaching methodology

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 (<https://posgrado.uam.es>). 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 y las dudas sobre las metodologías empleadas.

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

Lecture: The Professor will deliver lectures about the theoretical contents of the course.

Network teaching: All the tools available at the Moodle website (<https://posgrado.uam.es>) will be used (uploading of teaching materials, utilization of work team strategies, wiki, blogs, e-mail, etc.).

Seminars: The Professor and the students will discuss the results being obtained, the potential problems and difficulties in using the various methodologies as well as to supervise the preparation of the required reports.

Tutoring sessions: The professor can organize either individual or group tutoring sessions about particular topics and questions raised by students.

3. Tiempo de trabajo del estudiante / Student workload

Presencial:

Clases teóricas.....	56 horas
Seminarios.....	8 horas

No Presencial:

Estudio autónomo individual o en grupo.....	65 horas
Preparación de seminarios.....	36 horas
Elaboración de una memoria con ejercicios planteados en clase.....	60 horas

TOTAL (9 ECTS * 25 horas/ECTS).....	225 horas
-------------------------------------	-----------



Asignatura: Teoría Avanzada de la Estructura Electrónica y la de la Materia Condensada
Código: 31235
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 9 ECTS

Contact hours:

Theoretical lessons in classroom..... 56 hours
Seminars..... 8 hours

Independent study hours:

self-study or group study 65 hours
Preparation of seminars, assigned tasks and study..... 36 hours
Elaboration of a memory based on the exercises proposed in class..... 60 hours

TOTAL (9 ECTS * 25 hours/ECTS)..... 225 hours

4. Métodos de evaluación y porcentaje en la calificación final / Evaluation procedures and weight of components in the final grade

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.

The next criteria will be followed for assessment of student exercises:

- 60% Elaboration of a memory based on the exercises proposed in class.
- 40% Discussions between the student and professor in tutoring sessions and seminars about the exercises proposed in class.

5. Cronograma / Course calendar

La edición número 13 del Curso Intensivo del Máster en Química Teórica y Modelización Computacional tendrá lugar en la Università degli Studi di Perugia (Italia) del 3 al 28 de septiembre de 2018.

Información del curso, conferencias y horario en:
<http://www.chm.unipg.it/chimgen/mb/theo2//TCCM2018/EM-TCCM2018/EM-TCCM/Welcome.html>

The 13th edition of the Intensive Course of the Master in Theoretical Chemistry and Computational Modelling will be organized at the Università degli Studi di Perugia (Italy) from 3rd to 28th September 2018.

Curso 2018-2019



Asignatura: Teoría Avanzada de la Estructura Electrónica y la de la
Materia Condensada
Código: 31235
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 9 ECTS

Further information of the Intensive Course, lectures, schedule on:

<http://www.chm.unipg.it/chimgen/mb/theo2//TCCM2018/EM-TCCM2018/EM-TCCM/Welcome.html>