Asignatura: Estados Excitados
Código: 31246
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Master en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Master
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

ASIGNATURA / COURSE TITLE

Estados Excitados / Excited states

1.1. Código / Course number

31246

1.2. Materia / Content area

Módulo 3. Optatividad / Module 3. Optional courses

1.3. Tipo / Course type

Optativa / Elective subject

1.4. Nivel / Course level

Master / Master

1.5. Curso / Year

1º / 1st

1.6. Semestre / Semester

Anual / Anual

1.7. Número de créditos / Credit allotment

5 créditos ECTS / 5 ECTS credits

1.8. Requisitos previos / Prerequisites

No hay requisitos previos / There are no previous prerequisites

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): Adolfo Bastida Pascual
Departamento de Química Física / Department of Physical Chemistry
Facultad de Química - Universidad de Murcia / Faculty of Chemistry - U. de Murcia
Correo electrónico/Email: bastida@um.es
Página web/Website: http://www.um.es/web/quimica-fisica/
Horario de atención al alumnado/Office hours: 9:00-11:00 (L-V)

Docente(s) / Lecturer(s): Inés Corral Pérez
Departamento de Química / Department of Chemistry
Facultad de Ciencias UAM / Faculty of Sciences UAM
Despacho - Módulo / Office – Module: 13 -307A
Teléfono / Phone: 91 497 8471
Correo electrónico/Email: ines.corral@uam.es
Página web/Website:
http://web.uam.es/departamentos/ciencias/quimica/estruct/ines/index.html
Horario de atención al alumnado/Office hours: contact by email

Docente(s) / Lecturer(s): Jesús González Vázquez
Departamento de Química / Department of Chemistry
Facultad de Ciencias UAM / Faculty of Sciences UAM
Despacho - Módulo / Office – Module: 13 -308
Teléfono / Phone: 91 497 3008
Correo electrónico/Email: jesus.gonzalezv@uam.es
Página web/Website: http://campusys.qui.uam.es/?page_id=379
Horario de atención al alumnado/Office hours: contact by email

Docente(s) / Lecturer(s): José Antonio Gámez
Institut für Technische und Makromolekulare Chemie (ITMC)
Despacho / Office: 98C 431
Teléfono / Phone: +49 241 80 26510
Correo electrónico/Email: gamez@itmc.rwth-aachen.de
Horario de atención al alumnado/Office hours: contact by email

Docente(s) / Lecturer(s): Lara Martínez
Departamento de Química / Department of Chemistry
Facultad de Ciencias UAM / Faculty of Sciences UAM
Despacho - Módulo / Office – Module: 13 -501a
Teléfono / Phone: 91 497 6144
Correo electrónico/Email: lara.martinezf@inv.uam.es
Horario de atención al alumnado/Office hours: contact by email

Docente(s) / Lecturer(s): Alberto Castro
Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos (BIFI)
Universidad de Zaragoza / University of Zaragoza
Teléfono / Phone: 876 55 53 54

Asignatura: Estados Excitados
Código: 31246
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Master en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Master
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

Correo electrónico/Email: acastro@bifi.es
Página web/Website: http://bifi.es/~acastro
Horario de atención al alumnado/Office hours: contact by email

1.11. Objetivos del curso / Course objectives

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

The present course aims to familiarize students with the treatment of both rovibrational and electronic excited states. At the end of the course, the student is expected to know the foundations of the most popular methods and to be able to manage the most frequently used programs for the treatment of excited states.

1.12. Contenidos del programa / Course contents

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.

1. Potential energy surfaces
   - Born-Oppenheimer approximation
   - Potential energy curves for diatomic molecules
   - Potential energy surfaces for poliatomic molecules.
2. Interaction radiation-matter
   - Classical model for electromagnetic radiation
   - Transition probabilities induced by radiation
3. Rovibrational spectra.
   - Diatomic molecules: energy levels, selection rules.
   - Pure rotational spectra and rovibrational spectra in diatomic molecules
   - Polyatomic molecules: classical vibrations and quantum vibrations.

- Rovibrational spectra in polyatomic molecules
- Vibrational relaxation in liquids: experimental methods and theoretical treatments.

4. Basic Concepts in Modern Molecular Photochemistry
   - Light absorption: (Electromagnetic radiation, the Lambert-Beer law, Absorption spectra, Franck-Condon principle, Transition dipole moment, Classical and quantum mechanical harmonic oscillator, Selection rules, Electronic transitions)
   - Deactivation of excited states: (Energy and electron transfer, Jablonski diagrams, Vibrational relaxation, Radiative and non radiative transitions, Franck-Condon principle for radiationless transitions, the Energy gap law, Time scales and quantum yields, Fermi's golden rule)
   - Excited potential energy surfaces: (surface crossings, photochemical reaction paths, Examples).

5. Quantum Chemical Calculations of Excited States: Multiconfigurational Methods.
   - Electron correlation in molecules.
   - Electronic Structure methods for excited states. Monoconfigurational vs. multiconfigurational methods. CASSCF and RASSCF methods. Choice of the active space. Single vs. state-average calculations. Basis sets considerations.
   - Introducing dynamical correlation: the CASPT2 method.
   - CASPT2 problems and solutions: intruder states, avoided crossings and valence-Rydberg mixing. The level shift technique and Multistate-CASPT2.
   - Examples.

6. Quantum Chemical Calculations of Excited States: TD-DFT Methods.
   - DFT, Runge-Gross theorems, linear response TDDFT, propagation of the electronic density.
   - Spectra calculation, approximation of xc-functionals,
   - Examples.

7. Dynamics simulations: Wave Packet propagations.
   - Time-evolution operator, Propagation, Relaxation method, Filtering method. Interaction with an electric field. Correlation functions, Spectra and eigenfunctions. Pump-probe spectroscopy and control.

8. TD-DFT for ultrafast dynamics.
   - Ab initio molecular dynamics: Born-Oppenheimer and Ehrenfest dynamics. Nonadiabatic dynamics, Tully's surface hopping. Examples of nonadiabatic ab initio molecular dynamics. Addition of environmental effects: Electromagnetic fields and solvents.

1.13. Referencias de consulta / Course bibliography

- 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).

2. Métodos docentes / Teaching methodology

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 (https://posgrado.uam.es). 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.

Lectures: The Professor will deliver lectures about the theoretical contents of the course during two-hour sessions. The presentations will be based on the different materials available at the Moodle platform.

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.).

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

Online Seminars: After the lecturing period, online seminars between the Professor and the students will be arranged at the *virtual classroom* in order to 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.

3. Tiempo de trabajo del estudiante / Student workload

Presencial:
Clases teóricas en aula / aula virtual ..... 35 horas

No Presencial:
Estudio autónomo individual o en grupo..... 50 horas
Elaboración de una memoria con ejercicios planteados en clase..... 40 horas

TOTAL (5 ECTS * 25 horas/ECTS)..... 125 horas

Contact hours:
Theoretical lessons in classroom / virtual classroom ..... 35 hours

Independent study hours:
self-study or group study ..... 50 hours
Elaboration of a memory based on the exercises proposed in class….. 40 hours

TOTAL (5 ECTS * 25 hours/ECTS)..... 125 hours

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

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:

- 40 % Actividades desarrolladas durante el transcurso de las clases presenciales.
- 60 % Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas y/o de ejercicios relacionados con la asignatura,

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 % la realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura.

Ordinary assessment
The knowledge acquired by the student will be evaluated along the course. The educational model to follow will emphasize a continuous effort and advance in training and learning.

The final student mark will be based on exercises that must be done during the course. The next criteria will be followed for assessment of student exercises:

- 40% activities during the lessons in classroom
- 60% from the student report about the practical work and/or exercicies.

Extraordinary assessment
The student will have to face a final exam, including both theory and practical exercises. The student mark will be obtained from:

- 70% from the final exam,
- 30% from the individual work.

5. Cronograma* / Course calendar

Por favor, comprobar el horario oficial publicado en la página web del Máster.
Please, check the official schedule posted on the master website.

*Este cronograma tiene carácter orientativo
*This course calendar is orientative