



Asignatura: Métodos de la Química Teórica I
Código: 32527
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación bligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

1. ASIGNATURA / COURSE TITLE

Métodos de la Química Teórica I / [Theoretical Chemistry Methods I](#)

1.1. Código / Course number

32527

1.2. Materia / Content area

Módulo 2. Métodos / [Module 2. Methods](#)

1.3. Tipo / Course type

Obligatoria / [Compulsory subject](#)

1.4. Nivel / Course level

Máster / [Master](#)

1.5. Curso / Year

1º / [1st](#)

1.6. Semestre / Semester

2º / [2nd](#)

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](#)



Asignatura: Métodos de la Química Teórica I
Código: 32527
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación bligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

1.10. Datos del equipo docente / Faculty data

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Alfredo Sánchez (Coordinador / **Coordinator**)
Departamento de / **Department of Physical Chemistry**
Universidad de / **University of Valencia**
Teléfono / **Phone**: 963 544 712
Correo electrónico/**Email**: sanchez@uv.es
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: 10:00-14:00

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Victor Rayón
Departamento de Química/ **Department of Chemistry**
Universidad de Valladolid / **University of Valladolid**
Teléfono / **Phone**: 983184017
Correo electrónico/**Email**: victormanuel.rayon@uva.es
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: 10:00-14:00

1.11. Objetivos del curso / Course objectives

1.11a. Resultados del aprendizaje

Después de cursar la asignatura los alumnos deberá estar en capacidad de:

- Comprender los fundamentos teóricos y prácticos de técnicas computacionales con las que puede analizar la estructura electrónica, morfológica y estructural de un compuesto e interpretar adecuadamente los resultados.
- Entender los principios básicos de las metodologías "ab initio" y Teoría de los Funcionales de la Densidad.
- Discernir entre los diferentes métodos existentes y cómo seleccionar el más adecuado para cada problema.
- Demostrar su conocimiento y comprensión de los hechos aplicando conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química Teórica y Modelización Computacional.

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.



Asignatura: Métodos de la Química Teórica I
Código: 32527
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

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.

CG02 - Los estudiantes son capaces de resolver problemas y tomar decisiones de cualquier índole bajo el compromiso con la defensa y práctica de las políticas de igualdad.

TRANSVERSALES

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

ESPECÍFICAS

CE01 - Los estudiantes demuestran su conocimiento y comprensión de los hechos aplicando conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química Teórica y Modelización Computacional.

CE04 - Comprende los fundamentos teóricos y prácticos de técnicas computacionales con las que puede analizar la estructura electrónica, morfológica y estructural de un compuesto e interpreta adecuadamente los resultados.

CE15 - Entiende los principios básicos de las metodologías "ab initio" y Teoría de los Funcionales de la Densidad.

CE16 - El/la estudiante es capaz de discernir entre los diferentes métodos existentes y cómo seleccionar el más adecuado para cada problema.



Asignatura: Métodos de la Química Teórica I
Código: 32527
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación bligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

1.11a. Learning objectives

As a result of participating in this course, students will be able to:

- Understand the theoretical and practical bases of computational techniques used in the electronic, structural and morphological analysis of a compound and interpret the results adequately.
- Understand the basic principles of "ab initio" methods, and Density Functional Theory.
- Shed light on what method is the most appropriate for each problem, considering the differences between them.
- Demonstrate knowledge and comprehension of the facts, applying concepts, principles and theories associated with Theoretical Chemistry and Computational Modelling.

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.

CG02 - Students are able to solve problems and make decisions of any kind under the commitment to the defense and practice of equality policies.



Asignatura: Métodos de la Química Teórica I
Código: 32527
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

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

CE01- Students demonstrate their knowledge and understanding of the facts applying concepts, principles and theories related to the Theoretical Chemistry and Computational Modeling.

CE04 - Students understand the theoretical and practical bases of computational techniques with which they can analyze the electronic, morphological and structural structure of a compound and interpret the results adequately.

CE15 - Students understand the basic principles of "ab initio" methodologies and Density Functional Theory.

CE16 - Students are able to discern between the different existing methods and know how to select the most appropriate method for each problem.

1.12. Contenidos del programa / Course contents

1. Métodos Ab initio:

- Método de Hartree-Fock: RHF y UHF
- Funciones de base, pseudopotenciales y potenciales efectivos.
- Visión general de métodos variacionales basados en función de onda: interacción de configuraciones y métodos multiconfiguracionales
- Teoría de perturbaciones Moller-Plesset
- Introducción a los métodos Coupled Cluster

2. Teoría del Funcional de la Densidad:

- Conceptos preliminares. Teoremas de Hohenberg-Kohn.
- Método de Kohn-Sham.
- Aproximaciones al potencial de intercambio-correlación (DFAs)

En la parte de Métodos de la Química Cuántica se cubre los teoremas fundamentales en los que se basan los métodos y la formulación de los principales métodos "ab initio". En el apartado correspondiente a la Teoría del Funcional de la Densidad se pretende que el alumno entienda los principios básicos de la teoría y comprenda cómo se desarrollan los principales tipos de funcionales de intercambio-correlación y sus características. El alumno debe ser capaz de discernir entre los diferentes métodos existentes cómo seleccionar el más adecuado para cada problema.



Asignatura: Métodos de la Química Teórica I
Código: 32527
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación bligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

1. Ab initio Methods:

- Hartree-Fock methods: RHF y UHF
- Basis functions, pseudopotentials and effective potential.
- Variational wavefunction-based Electron Correlation Methods: Configuration Interaction and multiconfigurational methods
- Moller-Plesset Perturbation Theory
- Introduction to Coupled Cluster methods

2. Density Functional Theory:

- Preliminary concepts. Hohenberg-Kohn Theorems.
- Kohn-Sham Method.
- Density Functional Approximations (DFAs; approximations to exchange-correlation functionals)

In the part of Quantum Chemical Methods we will formulate the main theorems in which the different methodologies are based and the most important "ab initio" methods will be studied. In the Functional Density Theory section the students should understand the basic ideas in which the theory is based. The student should understand how the different correlation-exchange functionals are developed and their main features. The student should know how to select the most adequate method for a fixed problem.

1.13. Referencias de consulta / Course bibliography

- Helgaker, T., Jørgensen, P., Olsen, J.; Molecular Electronic-Structure Theory. John Wiley & Sons Ltd, 2000
- Szabo, A., Ostlund, N. S.; Modern Quantum Chemistry. Introduction to Advanced Electronic Structure Theory. McGraw-Hill, 1989
- Roos, B. Editor; Lecture notes in quantum chemistry: European summer school in quantum chemistry. Springer-Verlag 1994. Chapters on CC, CI, MCSCF, calibration
- Linear-Scaling Techniques in Computational Chemistry and Physics. Zaleśny, R.; Papadopoulos, M.G.; Mezey, P.G.; Leszczynski, J. (Eds.). Springer (Berlin) 2011
- A Chemist's Guide to Density Functional Theory. W. Koch and M.C. Holthausen, Wiley-VCH, 2001
- Density-Functional Theory of Atoms and Molecules. R.G. Parr and W. Yang, Oxford University Press, New York, 1989
- Electronic Structure. R.M. Martin, Cambridge University Press, Cambridge, 2004



Asignatura: Métodos de la Química Teórica I
 Código: 32527
 Centro: Facultad de Ciencias
 Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
 Nivel: Máster
 Tipo: Formación obligatoria
 Nº de créditos: 5 ECTS

2. Métodos docentes / Teaching methodology

Lección Magistral: El profesor expondrá los contenidos del curso en sesiones presenciales, o, por video conferencia 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.

Lecture: The Professor will deliver face-to-face, or, online video 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 (<http://www.uam.es/moodle>) 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.....20 horas
 Seminarios.....15 horas

No Presencial:

Estudio autónomo individual o en grupo.....40 horas



Asignatura: Métodos de la Química Teórica I
 Código: 32527
 Centro: Facultad de Ciencias
 Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
 Nivel: Máster
 Tipo: Formación bligatoria
 N° de créditos: 5 ECTS

Preparación de seminarios.....	20 horas
Elaboración de una memoria con ejercicios planteados en clase.....	30 horas
TOTAL (5 ECTS * 25 horas/ECTS).....	125 horas

Contact hours:

Theoretical lessons in classroom / virtual classroom	20 hours
Seminar.....	15 hours

Independent study hours:

self-study or group study	40 hours
Preparation of seminars, assigned tasks and study.....	20 hours
Elaboration of a memory based on the exercises proposed in class.....	30 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:

- 70 % Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura,
- 30 % la discusión que sobre la misma se realice con el profesor en tutorías y seminarios.

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



Asignatura: Métodos de la Química Teórica I
Código: 32527
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación bligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

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:

- 70% from the student report,
- 30% from discussions between the student and professor in tutoring sessions and seminars.

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