



Asignatura: Profundización en los Métodos de la Química Teórica
Código: 32529
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

1. ASIGNATURA / **COURSE TITLE**

Profundización en los Métodos de la Química Teórica / [Deepening in Methods of Theoretical Chemistry](#)

1.1. Código / **Course number**

32529

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**

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: Profundización en los Métodos de la Química Teórica
Código: 32529
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

1.10. Datos del equipo docente / Faculty data

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Marcos Mandado Alonso (coordinador)
Departamento de Química Física / **Department of Physical Chemistry**
Universidad de Vigo/ **Vigo University**
Teléfono / **Phone**: +34 986813812
Despacho - Módulo / **Office - Module**:
Correo electrónico/**Email**: mandado@uvigo.es
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: contact by email

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Paula Mori
Departamento de Química / **Department of Chemistry**
Universidad Autónoma de Madrid / **University Autonoma de Madrid**
Facultad de Ciencias / **Faculty of Sciences**
Despacho 504 Módulo 13 / **Office 504 Module13**
Teléfono / **Phone**: +34 914974961
Correo electrónico/**Email**: paula.mori@uam.es
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: contact by email

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Ramón López Rodríguez
Departamento de Química Física / **Department of Physical Chemistry**
Universidad de Oviedo/ **Oviedo University**
Despacho - Módulo / **Office - Module**: 152
Correo electrónico/**Email**: rlopez@uniovi.es
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: contact by email

1.11. Objetivos del curso / Course objectives

1.11a. Resultados del 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 monoeléctricas y bielectricas 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.



Asignatura: Profundización en los Métodos de la Química Teórica
Código: 32529
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

- 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.

1.11b. Competencias

Estos resultados del aprendizaje contribuyen a la adquisición de las siguientes competencias para el estudiante:

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.

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.



Asignatura: Profundización en los Métodos de la Química Teórica
Código: 32529
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

TRANSVERSALES

CT02 - El/la estudiante es organizado en el trabajo demostrando que sabe gestionar el tiempo y los recursos de que dispone.

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.

1.11a. Learning objectives

The purpose of this course is to provide students a deeper insight into the methods used in theoretical chemistry, with particular emphasis on students to deepen in the following aspects:

- Knowledge of the specific problems of quantum mechanical methods applied to large systems.
- Understanding and ability to discriminate between different analytical methods useful for solving one-electron and two-electron molecular integrals depending on the nature of these integrals.
- Understanding of the essential features of the numerical methods used to solve molecular integrals. As a result, ability to change parameters for each method in order to solve practical problems and to choose the most appropriate method for a specific problem.
- Detailed knowledge of some methods that accelerate the process of solving self-consistent equations.
- Knowledge of the fundamentals of local methods to evaluate the correlation energy.
- Detailed knowledge of the methodological grounds of most common methods
- Ability to estimate computational cost and scaling
- Estimation of the magnitude of the errors associated
- Ability to determine their applicability to a specific problem.
- Density functional theory: advanced math, functionals and recent concepts.
- Challenges for density functional theory.



Asignatura: Profundización en los Métodos de la Química Teórica
Código: 32529
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

1.11b. Skills

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

BASIC AND GENERAL SKILLS

CB6 - To 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 - That students know how to apply the acquired knowledge and their ability to solve problems in new or unfamiliar environments within broader (or multidisciplinary) contexts related to their area of study.

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

CB9 - That students know how to communicate their conclusions and the knowledge and ultimate reasons that sustain them to specialized and non-specialized audiences in a clear and unambiguous way.

CB10 - That students have the learning skills that allow them to continue studying in a way that will be largely self-directed or autonomous.

CG01 - That students are able to promote, in academic and professional contexts, technological and scientific advancement 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 people with disabilities, and c) the values of a culture of peace and democratic values.

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

TRANVERSAL SKILLS

CT02 - That students are organized at work demonstrating that they know how to manage the time and resources available.

SPECIFIC SKILLS

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

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



Asignatura: Profundización en los Métodos de la Química Teórica
Código: 32529
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

CE15 - To 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

- Integrales moleculares monoeléctricas. 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 y espín: error de deslocalización electrónica y error de correlación estática
- 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

- One-electron molecular integrals. Properties and analytical and numerical techniques.
- Two-electron molecular integrals. Screening, direct methods, decomposition techniques. Pseudospectral methods. Use of multipolar expansion.
- SCF Equations. Convergence. Methods adapted to sparse matrices.
- Efficiency of the method and scaling. Computational Cost.

- Introduction to electron correlation.



Asignatura: Profundización en los Métodos de la Química Teórica
Código: 32529
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

- Wavefunction-based methods:
 - Configuration Interaction
 - Coupled Cluster
 - Perturbation theory. MPn methods
 - Multireference methods
- Basis sets for electron correlation
- Introduction to explicitly correlated methods.
- Local methods for electron correlation.
- Intermolecular systems. Interaction energy partitioning methods.

- Density Functional Theory (DFT)
 - Exchange-correlation functional development: from LDA, GGA, hybrids to recent ideas
 - Exact conditions, adiabatic connection and other approaches
 - Kohn-Sham eigenvalues and the OEP method
 - Extension of DFT to fractional particle numbers and fractional spins: delocalization error and static correlation error
 - Time dependent DFT: linear response and explicit time propagation
 - Challenges for currently used approximations in DFT: strong correlation
 - The exact energy functional of DFT

1.13. Referencias de consulta / Course bibliography

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 Scientific, Singapore, **1995**

D. R. Yarkony (Ed.) *Direct Methods in Electronic Structure Theory, Vol. part I*, World Scientific, Singapore, **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.



Asignatura: Profundización en los Métodos de la Química Teórica
Código: 32529
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

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)

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 (<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.

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 (<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



Asignatura: Profundización en los Métodos de la Química Teórica
 Código: 32529
 Centro: Facultad de Ciencias
 Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
 Nivel: Máster
 Tipo: Formación Optativa
 N° de créditos: 5 ECTS

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 virtual20 horas
 Seminarios.....15 horas

No Presencial:

Estudio autónomo individual o en grupo.....40 horas
 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 classroom20 hours
 Seminars.....15 hours

Independent study hours:

self-study or group study40 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

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:



Asignatura: Profundización en los Métodos de la Química Teórica
Código: 32529
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

- 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.

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:

- 90% from the student report,
- 10% from discussions between the student and professor in tutoring sessions and seminars.

Extraordinary assessment

Contents that were failed in the ordinary assessment will be re-assessed through written reports focused on those contents. They will be done personally by the student in a fixed time period.

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