

23-24

MÁSTER UNIVERSITARIO EN CIENCIA Y  
TECNOLOGÍA QUÍMICA

# GUÍA DE ESTUDIO PÚBLICA



## MÉTODOS CUÁNTICOS EN SISTEMAS POLIATÓMICOS

CÓDIGO 2115154-

UNED

23-24

MÉTODOS CUÁNTICOS EN SISTEMAS  
POLIATÓMICOS  
CÓDIGO 2115154-

# ÍNDICE

PRESENTACIÓN Y CONTEXTUALIZACIÓN  
REQUISITOS Y/O RECOMENDACIONES PARA CURSAR ESTA  
ASIGNATURA  
EQUIPO DOCENTE  
HORARIO DE ATENCIÓN AL ESTUDIANTE  
COMPETENCIAS QUE ADQUIERE EL ESTUDIANTE  
RESULTADOS DE APRENDIZAJE  
CONTENIDOS  
METODOLOGÍA  
SISTEMA DE EVALUACIÓN  
BIBLIOGRAFÍA BÁSICA  
BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA  
RECURSOS DE APOYO Y WEBGRAFÍA

|                           |  |
|---------------------------|--|
| Nombre de la asignatura   | MÉTODOS CUÁNTICOS EN SISTEMAS POLIATÓMICOS           |
| Código                    | 2115154-   |
| Curso académico           | 2023/2024  |
| Título en que se imparte  | MÁSTER UNIVERSITARIO EN CIENCIA Y TECNOLOGÍA QUÍMICA |
| Tipo                      | CONTENIDOS   |
| Nº ETCS                   | 6  |
| Horas                     | 150.0  |
| Periodo                   | SEMESTRE 2   |
| Idiomas en que se imparte | CASTELLANO   |

## PRESENTACIÓN Y CONTEXTUALIZACIÓN

Esta asignatura está incluida en el MÁSTER UNIVERSITARIO EN CIENCIA Y TECNOLOGÍA QUÍMICA como asignatura optativa y pertenece al módulo de Química Física. También está incluida en el MÁSTER EN FÍSICA AVANZADA, dentro del módulo de Física Teórica, también con carácter optativo. Por lo tanto se trata de una asignatura donde es muy conveniente que el alumno haya realizado una licenciatura/grado en física o en química. Esta asignatura parte de los conocimientos básicos de Cuántica que el alumno ha adquirido en las asignaturas Química Física del grado en Química o de Física Cuántica del grado en Física.

Primeramente, tras un breve repaso de dichos aspectos básicos, se estudian los distintos métodos aproximados de resolución de la ecuación de onda para los sistemas que no admiten una solución exacta. Una vez cubierta esta etapa preparatoria, se introducen los nuevos métodos de cálculo computacionales y sus aplicaciones a la Química-Física. Así mismo se estudian las propiedades y el comportamiento de la materia a nivel atómico-molecular, a la luz de la teoría cuántica.

La asignatura tiene un carácter muy práctico, se hará especial hincapié en la utilización del cálculo con ordenador. Es por tanto, imprescindible contar con algún ordenador que pueda ser usado para realizar los ejercicios prácticos que se plantean. También es necesario tener ciertos conocimientos de programación adecuados (Fortran, C, etc.) para abordar el diseño de programas o códigos de cálculo simples.

## REQUISITOS Y/O RECOMENDACIONES PARA CURSAR ESTA ASIGNATURA

Los prerrequisitos para cursar esta asignatura son los de haber realizado una licenciatura o grado en Física o en Química, debiendo haber cursado las asignaturas de Matemáticas y Cuántica previas existentes en estos estudios de Grado. En particular puede resultar muy provechoso haber cursado las asignaturas de Química Física o de Física Cuántica.

En cualquier caso, se recomienda que cada estudiante refresque sus conocimientos de:

- Álgebra Lineal (espacios vectoriales, matrices y determinantes).
- Nociones básicas de estadística (probabilidad, valores medios, dispersión, etc.).
- Conocimientos básicos de Linux y de programación en Fortran, C, Matlab, o similares.

## EQUIPO DOCENTE

|                    |   |
|--------------------|---|
| Nombre y Apellidos | OSCAR GALVEZ GONZALEZ (Coordinador de asignatura) |
| Correo Electrónico | oscar.galvez@ccia.uned.es                         |
| Teléfono           | 91398-6343  |
| Facultad           | FACULTAD DE CIENCIAS                              |
| Departamento       | FÍSICA INTERDISCIPLINAR                           |
| Nombre y Apellidos | JULIO JUAN FERNANDEZ SANCHEZ                      |
| Correo Electrónico | jjfernandez@fisfun.uned.es                        |
| Teléfono           | 91398-7142  |
| Facultad           | FACULTAD DE CIENCIAS                              |
| Departamento       | FÍSICA FUNDAMENTAL                                |

## HORARIO DE ATENCIÓN AL ESTUDIANTE

### **Dr. D. Óscar Gálvez González.**

Correo: oscar.galvez@ccia.uned.es

Despacho: 0.23 (Centro Asociado de Las Rozas - Facultad de Ciencias)

Avda. Esparta s/n, 28232 - Las Rozas

Teléfono: 91 398 6346.

**Horario guardia: Lunes de 10 a 14**

### **Dr. D. Julio Juan Fernández Sánchez.**

Correo: jjfernandez@fisfun.uned.es

Despacho: XX (XXXX)

C/ Senda del Rey, 5, 28006 - Madrid

Teléfono: 91 398 7142.

**Horario guardia: Miércoles de 10 a 12 h y 16 a 18 h.**

## COMPETENCIAS QUE ADQUIERE EL ESTUDIANTE

### **COMPETENCIAS BÁSICAS:**

- .Adquirir la capacidad de comprensión de conocimientos y aplicación en la resolución de problemas
- .Desarrollar capacidad crítica y de evaluación
- .Adquirir capacidad de estudio y autoaprendizaje
- .Desarrollar capacidad creativa y de investigación
- .Comprender y manejar sistemáticamente los aspectos más importantes relacionados con un determinado campo de la química
- .Dominar las habilidades y métodos de investigación relacionados con el campo de estudio
- .Adquirir la capacidad de detectar carencias en el estado actual de la ciencia y tecnología
- .Desarrollar la capacidad para proponer soluciones a las carencias detectadas
- .Desarrollar la capacidad para proponer y llevar a cabo experimentos con la metodología adecuada, así como para extraer conclusiones y determinar nuevas líneas de investigación

### COMPETENCIAS Y GENERALES

- Comprender conceptos avanzados de Física y demostrar, en un contexto de investigación científica altamente especializada, una relación detallada y fundamentada entre los aspectos teóricos y prácticos y la metodología empleada en este campo.
- Utilizar bibliografía y fuentes de información especializada, propias del ámbito de conocimiento de la física, manejando las principales bases de datos de recursos científicos.
- CG5 - Poseer la capacidad para el desarrollo de una aptitud crítica ante el aprendizaje que le lleve a plantearse nuevos problemas desde perspectivas no convencionales.
- Saber trabajar en equipo y comunicarse con la comunidad académica en su conjunto y con la sociedad en general acerca de la Física Avanzada, tanto en sus implicaciones académicas, productivas o sociales.
- Adquirir los conocimientos necesarios en Física Avanzada para incorporarse a un grupo de investigación o a empresas.

### COMPETENCIAS ESPECÍFICAS:

- .Analizar, interpretar y discutir los resultados obtenidos en la experimentación en el ámbito de la química
- .Manejar equipos e instrumentos especializados

## RESULTADOS DE APRENDIZAJE

Los principales resultados de aprendizaje que se espera que se adquieran al cursar la asignatura son:

- Conocer la relevancia de los métodos de cálculo más usados en Química Cuántica y Física de la Materia Condensada.
- Entender la estructura atómica de sistemas formados por varios átomos.
- Entender la relevancia de las distintas aproximaciones que se pueden hacer para resolver la ecuación de Schrödinger en sistemas de varios átomos.
- Comprender de la complejidad intrínseca de los métodos de la Química Cuántica y de su utilidad para el entendimiento de las propiedades de los sistemas moleculares.
- Familiarizarse con el uso de programas que permiten obtener las propiedades de sistemas cuánticos de unos pocos átomos y entender sus términos y limitaciones.
- Usar herramientas informáticas (lenguajes de programación, aplicaciones de visualización y tratamiento de datos, y aplicaciones de cálculo simbólico) en el contexto de la física y matemática aplicada.
- Analizar críticamente las bondades y las limitaciones de los métodos aproximados de resolución de problemas moleculares sencillos.

## CONTENIDOS

TEMA 1. La ecuación de Schrödinger

TEMA 2. Método de Variaciones

TEMA 3. Teoría de perturbaciones

TEMA 4. Espín electrónico y Principio de Pauli

TEMA 5. Estructura electrónica de sistemas polielectrónicos

TEMA 6. Cálculos de orbitales moleculares: Métodos ab initio

TEMA 7. Cálculos de orbitales moleculares: Métodos semiempíricos y de Mecánica Molecular.

TEMA 8. Aplicaciones de los métodos

## METODOLOGÍA

La docencia se impartirá principalmente a través de un curso virtual dentro de la plataforma educativa de la UNED. Dentro del curso virtual los estudiantes dispondrán de:

- Plan de trabajo donde se da la bienvenida y se estructura el curso según el programa de contenidos.
- Guía de estudio, donde se establece el orden temporal de actividades y sugerencias sobre el reparto temporal de la materia, para que el estudiante lo adapte a su disponibilidad y necesidades.
- Materiales. El alumno dispondrá de materiales principales para el curso:
- Apuntes elaborados por el equipo docente y materiales on-line para seguir cada una de las partes del temario.
- Materiales complementarios seleccionados por el equipo docente.
- Guiones de las prácticas obligatorias y voluntarias.
- Enlaces a material de interés.

- Herramientas de comunicación:
- Foros de debate, donde se intercambian conocimientos y se resuelven dudas de tipo conceptual o práctico.
- Plataforma de entrega de los pruebas de evaluación continua y herramientas de calificación.
- Seminario para la utilización del software ab initio.
- Actividades y trabajos:
- Participación en los foros de debate.
- Trabajos propuestos por el equipo docente a lo largo del curso.

Gran parte de la formación recae sobre el trabajo personal del alumno con la bibliografía recomendada, básica y complementaria, siempre con la ayuda del equipo docente y de las tecnologías de la UNED.

Fuera del curso virtual el estudiante también tendrá acceso a realizar consultas al equipo docente a través del correo, teléfono y presencialmente en los horarios establecidos.

Por lo que se refiere a la división temporal de las actividades del alumno en la asignatura, en el curso virtual estará disponible un esquema temporal con una estimación del tiempo que se debería dedicar a cada tema.

## SISTEMA DE EVALUACIÓN

### TIPO DE PRUEBA PRESENCIAL

Tipo de examen No hay prueba presencial

### CARACTERÍSTICAS DE LA PRUEBA PRESENCIAL Y/O LOS TRABAJOS

Requiere Presencialidad No

#### Descripción

No hay Prueba Presencial como tal.

**La evaluación de esta asignatura se efectúa por la realización de dos trabajos, que son individuales y obligatorios y un trabajo opcional. Estos trabajos, así como el guion e instrucciones necesarias para su realización, se envían a cada estudiante durante el curso.**

**- Trabajos obligatorios: Estos trabajos consistirán principalmente en la realización de prácticas con ordenador a través de un software de cálculo ab initio. Pueden también consistir en la programación de un método simple de cálculo para la resolución de la ecuación de Schrödinger o de alguna parte de las metodologías empleadas en los cálculos químico-cuánticos. Adicionalmente también puede haber un trabajo que sea la realización de problemas o cuestiones relacionadas con el temario.**

#### Criterios de evaluación

Los trabajos estarán sometidos a un proceso de revisión por parte del Equipo Docente.

**Trabajos obligatorios: Se evaluará la resolución correcta de las prácticas o ejercicios, así como la exposición clara y estructurada de los mismos. También se tendrá muy en cuenta la correcta representación de los datos en gráficas y tablas.**

|   |  |
|---|--|
| Ponderación de la prueba presencial y/o los trabajos en la nota final | Cada uno de los trabajos obligatorios contarán un 50 % de la nota final. Es necesario la realización de ambos trabajos para aprobar la asignatura y se requiere una nota mínima de 4 en cada uno para aprobar. |
| Fecha aproximada de entrega   | A definir en el curso. De manera aproximada, el primer trabajo obligatorio se deberá entregar antes del 31/03/2024 y el segundo trabajo y la práctica voluntaria antes del 19/05/2024.                         |

#### Comentarios y observaciones

Aquellos alumnos que no aprueben en la convocatoria de junio, podrán optar a la convocatoria de Septiembre. Para aprobar en esta convocatoria, deberán presentar nuevamente los trabajos obligatorios, aunque se les conservaría la nota del trabajo obligatorio que tuvieran aprobado si así lo desean.

#### PRUEBAS DE EVALUACIÓN CONTINUA (PEC)

¿Hay PEC? No

Descripción

Criterios de evaluación

Ponderación de la PEC en la nota final

Fecha aproximada de entrega

Comentarios y observaciones

#### OTRAS ACTIVIDADES EVALUABLES

¿Hay otra/s actividad/es evaluable/s? Si, no presencial

Descripción

Trabajo optativo: Este trabajo consistirá en una revisión y análisis de un artículo de investigación donde se emplean cálculos ab initio como herramienta principal.

Criterios de evaluación

Trabajo optativo: Se valorará la profundidad científica del comentario, la claridad y argumentación de las explicaciones, así como la correcta narrativa y ortografía.

Ponderación en la nota final

El trabajo optativo contará un máximo de 1 punto a sumar si se tiene aprobada la asignatura con los trabajos obligatorios.

Fecha aproximada de entrega

A definir en el curso

Comentarios y observaciones

En la convocatoria de Septiembre no se puede entregar el trabajo optativo, aunque si se tendría en cuenta para la nota final si se hubiera presentado en la convocatoria de junio.



### ¿CÓMO SE OBTIENE LA NOTA FINAL?

Cada uno de los trabajos obligatorios contarán un 50 % de la nota final. Es necesaria la realización de ambos trabajos para aprobar la asignatura y se requiere una nota mínima de 4 en cada uno para aprobar.

**El trabajo optativo podrá sumar hasta un punto como máximo en la nota global siempre que esté aprobada la asignatura con la entrega de los trabajos obligatorios.**

**En la convocatoria de septiembre el criterio de evaluación sigue siendo la presentación de los dos trabajos obligatorios. En caso de haber aprobado algún trabajo en junio, la nota se guardaría para septiembre si el alumno lo desea. En la convocatoria de septiembre no se puede presentar el trabajo optativo.**

## BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

El curso virtual contiene como material didáctico para los contenidos de cada tema del programa de esta asignatura, en el que se incluyen además las prácticas y/o trabajos con sus correspondientes guiones.

## BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

ISBN(13):9781118825990

Título:INTRODUCTION TO COMPUTATIONAL CHEMISTRY (Third Edition)

Autor/es:Frank Jensen ;

Editorial:: JOHN WILEY & SONS

ISBN(13):9788420530963

Título:QUÍMICA CUÁNTICA (5ª)

Autor/es:Levine, Ira N. ;

Editorial:PRENTICE-HALL

En el libro de "Química Cuántica" de Levine, puede encontrar todos los temas que se tratan en este curso, explicados de una manera muy didáctica

El libro de "Introduction to Computational Chemistry" de Jensen es toda una referencia para aprender y entender los fundamentos de los métodos químico cuánticos.

## RECURSOS DE APOYO Y WEBGRAFÍA

A través del curso virtual se pondrá a disposición del estudiante diverso material de apoyo para su proceso de aprendizaje.

---

## IGUALDAD DE GÉNERO

En coherencia con el valor asumido de la igualdad de género, todas las denominaciones que en esta Guía hacen referencia a órganos de gobierno unipersonales, de representación, o miembros de la comunidad universitaria y se efectúan en género masculino, cuando no se hayan sustituido por términos genéricos, se entenderán hechas indistintamente en género femenino o masculino, según el sexo del titular que los desempeñe.