24-25

GUÍA DE ESTUDIO PÚBLICA

MÉTODOS CUÁNTICOS EN SISTEMAS POLIATÓMICOS

CÓDIGO 2115154-

UNED

24-25

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
IGUALDAD DE GÉNERO

Nombre de la asignatura	MÉTODOS CUÁNTICOS EN SISTEMAS POLIATÓMICOS
Código	2115154-
Curso académico	2024/2025
Título en que se imparte	**MÁSTER UNIVERSITARIO EN CIENCIA Y TECNOLOGÍA QUÍMICA** MÁSTER UNIVERSITARIO EN FÍSICA AVANZADA
Tipo	CONTENIDOS
Nº ETCS	6
Horas	150
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/a de asignatura)
Correo Electrónico	oscar.galvez@ccia.uned.es
Teléfono	
Facultad	
Departamento	

Nombre y Apellidos	JULIO JUAN FERNANDEZ SANCHEZ
Correo Electrónico	jjfernandez@fisfun.uned.es
Teléfono	
Facultad	
Departamento	

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: Edificio Biblioteca UNED, planta 1 (Mediateca)
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
CM1 Poseer la capacidad para el desarrollo de una aptitud crítica ante el aprendizaje que le lleve a plantearse nuevos problemas desde perspectivas no convencionales
CM2 Adquirir los conocimientos necesarios en Física Avanzada para incorporarse a un grupo de investigación o a empresas
CM3 Adquirir la capacidad para abordar y resolver un problema avanzado en la física teórica, computacional o de fluidos, mediante la elección adecuada del contexto teórico, la identificación de los conceptos relevantes y el uso de las técnicas matemáticas que constituyen la mejor aproximación para así llegar a la solución
CM4 Analizar una situación compleja extrayendo cuales son las cantidades físicas relevantes y ser capaz de reducirla a un modelo parametrizado
CM5 Analizar problemas nuevos en sistemas poco conocidos y determinar similitudes y diferencias con modelos de referencia.

CM6 Analizar críticamente resultados experimentales, analíticos y numéricos en el campo de la física avanzada

RESULTADOS DE APRENDIZAJE

CONOCIMIENTOS O CONTENIDOS

CN1 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

CN2 Conocer y comprender los elementos más relevantes de la física teórica, computacional y de fluidos actual. Profundizar en la comprensión de las teorías que se encuentran en la frontera de estos temas, incluyendo su estructura matemática, su confrontación con resultados experimentales, y la descripción de los fenómenos físicos que dichas teorías explican

CN4 Comprender las propiedades cualitativas de las soluciones a las ecuaciones de la física (sus tipos, estabilidad, singularidades, etc.) y su dependencia de los parámetros que definen un sistema físico.

HABILIDADES O DESTREZAS

H3 Utilizar bibliografía y fuentes de información especializada, propias del ámbito de conocimiento de la física, manejando las principales bases de datos de recursos científicos

H4 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.

H5 Modelizar sistemas de alto grado de complejidad. Identificar variables y parámetros relevantes y realizar aproximaciones que simplifiquen el problema. Construir modelos físicos que describan y expliquen situaciones en ámbitos diversos

H7 Resolver problemas algebraicos, de resolución de ecuaciones y de optimización mediante métodos numéricos

H8 Modelar y simular fenómenos físicos complejos por ordenador

COMPETENCIAS

CM1 Poseer la capacidad para el desarrollo de una aptitud crítica ante el aprendizaje que le lleve a plantearse nuevos problemas desde perspectivas no convencionales

CM2 Adquirir los conocimientos necesarios en Física Avanzada para incorporarse a un grupo de investigación o a empresas

CM3 Adquirir la capacidad para abordar y resolver un problema avanzado en la física teórica, computacional o de fluidos, mediante la elección adecuada del contexto teórico, la identificación de los conceptos relevantes y el uso de las técnicas matemáticas que constituyen la mejor aproximación para así llegar a la solución

CM4 Analizar una situación compleja extrayendo cuales son las cantidades físicas relevantes y ser capaz de reducirla a un modelo parametrizado

CM5 Analizar problemas nuevos en sistemas poco conocidos y determinar similitudes y

diferencias con modelos de referencia.
CM6 Analizar críticamente resultados experimentales, analíticos y numéricos en el campo de la física avanzada

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 técnologías 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 en la realización de problemas y cuestiones relacionadas con el temario y 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.

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 de abril y el segundo trabajo y la práctica voluntaria en el mes de mayo

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 principalmente en la realizacion de simulaciones con un programa de cálculo ab iniio. Adicionalmente podría realizarse la revisión de un artículo de investigación donde se emplean cálculos ab initio como herramienta principal.

Criterios de evaluación

Trabajo optativo: Se valuará 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 edición
Autor/es: Frank Jensen
Editorial: : JOHN WILEY & SONS

ISBN(13): 9788420530963
Título: QUÍMICA CUÁNTICA 5ª edición
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.