

**FITXA IDENTIFICATIVA****Dades de l'Assignatura**

Codi	43989
Nom	Mecànica estadística i aplicacions en simulació
Cicle	Màster
Crèdits ECTS	5.0
Curs acadèmic	2022 - 2023

Titulació/titulacions

Titulació	Centre	Curs	Període
2184 - M.U. en Química Teòrica i Modelització Computacional 13-V.1	Facultat de Química	1	Anual

Matèries

Titulació	Matèria	Caràcter
2184 - M.U. en Química Teòrica i Modelització Computacional 13-V.1	1 - Fonaments	Obligatòria

Coordinació

Nom	Departament
SANCHEZ MARIN, JOSE	315 - Química Física
TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO	315 - Química Física

RESUM**CONEIXEMENTS PREVIS****Relació amb altres assignatures de la mateixa titulació**

No heu especificat les restriccions de matrícula amb altres assignatures del pla d'estudis.

Altres tipus de requisits



COMPETÈNCIES

2184 - M.U. en Química Teòrica i Modelització Computacional 13-V.1

- Que els estudiants sàpiguen aplicar els coneixements adquirits i la seua capacitat de resolució de problemes en entorns nous o poc coneguts dins de contextos més amplis (o multidisciplinaris) relacionats amb la seua àrea d'estudi.
- Que els estudiants siguen capaços d'integrar coneixements i afrontar la complexitat de formular judicis a partir d'una informació que, sent incompleta o limitada, incloga reflexions sobre les responsabilitats socials i ètiques vinculades a l'aplicació dels seus coneixements i judicis.
- Que els estudiants sàpiguen comunicar les conclusions (i els coneixements i les raons últimes que les sustenten) a públics especialitzats i no especialitzats d'una manera clara i sense ambigüitats.
- Que els estudiants posseïsquen les habilitats d'aprenentatge que els permeten continuar estudiant d'una forma que haurà de ser en gran manera autodirigida o autònoma.
- Posseir i comprendre coneixements que aportin una base o oportunitat de ser originals en el desenvolupament i / o aplicació d'idees, sovint en un context de recerca.
- Els estudiants han de ser capaços de fomentar, en contextos acadèmics i professionals, l'avanç tecnològic i científic dins d'una societat basada en el coneixement i en el respecte a: a) els drets fonamentals i d'igualtat d'oportunitats entre hòmens i dones, b) els principis d'igualtat d'oportunitats i accessibilitat universal de les persones amb discapacitat i c) els valors propis d'una cultura de pau i de valors democràtics.
- L'estudiant és capaç d'adaptar-se a diferents entorns culturals.
- Comprendre els fonaments teòrics i pràctics de tècniques amb les que pot analitzar l'estructura electrònica, morfològica i estructural d'un compost.
- L'estudiant comprén la base de la Mecànica Estadística formulada a partir de les col·lectivitats.
- L'estudiant ha de saber calcular funcions de partició i aplicar les estadístiques quàntiques i la clàssica als sistemes ideals d'interés en Química.
- L'estudiant comprén i maneja les ferramentes matemàtiques requerides per al desenrotllament de la Química Teòrica en els seus aspectes fonamentals i les seues aplicacions.

RESULTATS DE L'APRENTATGE

DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

1.



2.

VOLUM DE TREBALL

ACTIVITAT	Hores	% Presencial
Classes de teoria	25,00	100
Seminaris	10,00	100
Elaboració de treballs individuals	30,00	0
Estudi i treball autònom	40,00	0
Preparació de classes pràctiques i de problemes	20,00	0
TOTAL	125,00	

METODOLOGIA DOCENT**AVALUACIÓ****REFERÈNCIES****Bàsiques**

- Theoretical and Computational Chemistry: Foundations, Methods and Techniques. J. Andrés y J. Bertrán. Eds. Publ. Univ. Jaime I (Castellón) 2007

Chandler, D., "Introduction to Modern Statistical Mechanics", (Oxford University Press, London, 1986)

Hill, T. L., An Introduction to Statistical Thermodynamics (Dover, New York) 1986

McQuarrie, D. A., Statistical Mechanics, (Harper and Row, New York) 1976

Toda, M., Kubo, R., Saito, N., "Statistical Physics I, (Springer-Verlag, Heidelberg) 1992

Frenkel, D, Smit, B., Understanding Molecular Simulation (Academic Press, San Diego) , 2002