

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

Codi	43995
Nom	Teoria avançada de l'estructura electrònica i de la matèria condensada
Cicle	Màster
Crèdits ECTS	9.0
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	2	Anual

Matèries

Titulació	Matèria	Caràcter
2184 - M.U. en Química Teòrica i Modelització Computacional 13-V.1	3 - Aspectes avançats	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 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.
- Coneixement d'una llengua estrangera
- 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.
- Conèixer i avaluar críticament l'aplicabilitat dels mètodes avançats de la Química Quàntica als sistemes cuasidegenerados, com ara, sistemes amb metalls de transició o estats excitats (la seua espectroscòpia i reactivitat) .
- Conèixer les teories i els mètodes de càlcul per a l'estudi de sòlids i superfícies; avaluació crítica de la seua aplicabilitat a problemes de catàlisi, magnetisme, conductivitat, etc.
- Conèixer l'existència de tècniques computacionals avançades com ara: canalització d'instruccions i dades, processadors superescalar i multiescalares, operacions en cadena, plataformes en paral·lel, etc.

2193 - M.ErasmMund en Química Teòrica i Modelització Computacional

- 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 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.



- Conèixer i avaluar críticament l'aplicabilitat dels mètodes avançats de la Química Quàntica als sistemes cuasidegenerados, com ara, sistemes amb metalls de transició o estats excitats (la seua espectroscòpia i reactivitat) .
- Conèixer les teories i els mètodes de càlcul per a l'estudi de sòlids i superfícies; avaluació crítica de la seua aplicabilitat a problemes de catàlisi, magnetisme, conductivitat, etc.
- Conèixer l'existència de tècniques computacionals avançades com ara: canalització d'instruccions i dades, processadors superescalar i multiescalares, operacions en cadena, plataformes en paral·lel, etc.

RESULTATS DE L'APRENTATGE

DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

1.

VOLUM DE TREBALL

ACTIVITAT	Hores	% Presencial
Classes de teoria	56,00	100
Seminaris	8,00	100
TOTAL	64,00	

METODOLOGIA DOCENT

AVALUACIÓ

REFERÈNCIES

Bàsiques

- [1] Introduction to quantum mechanics, David J. Tannor, University Science Books (2007)
- [2] A method for solving the molecular Schrödinger equation in Cartesian coordinates via angular momentum projection operators. J. Suarez, S. Stamatiadis, L. Lathouwers, S.C. Farantos, Comp. Phys. Comm. 180, p225 (2009)
- [3] Quantum Molecular Dynamics on Grids, R. Kosloff, Dynamics of Molecules and Chemical Reactions (editors R. E. Wyatt and J. Z. H. Zhang), CRC Press (1996)