

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

Codi	43996
Nom	Tècniques computacionals avançades
Cicle	Màster
Crèdits ECTS	6.0
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 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.
- 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.
- L'estudiant és capaç d'adaptar-se a diferents entorns culturals.
- L'estudiant ha de ser capaç de mantindre una conversació en una llengua estrangera, normalment anglés, i s'expressa correctament tant en forma oral com escrita.
- 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 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 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.
- L'estudiant ha de ser capaç de mantindre una conversació en una llengua estrangera, normalment anglés, i s'expressa correctament tant en forma oral com escrita.
- 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'APRENENTATGE

DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

1.

**VOLUM DE TREBALL**

ACTIVITAT	Hores	% Presencial
Classes de teoria	32,00	100
Tutories reglades	10,00	100
Elaboració de treballs individuals	35,00	0
Estudi i treball autònom	50,00	0
Preparació de classes pràctiques i de problemes	23,00	0
TOTAL	150,00	

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

- W. Schattke and R. Diez, Quantum Monte Carlo Programming, Wiley 2013.
- J. Singh, Electronic and optoelectronic properties of semiconductor structures, Cambridge University Press 2003.
- A. Costantini, S. Tasso, O. Gervasi (2009). Visualization and Web Services for Studying Molecular Properties. in O. GERVASI, D. TANIAR, Y. MUN, A. IGLESIAS, M.L. GAVRILOVA: Selected Papers of the 2009 International Conference on Computational Science and Applications IEEE Computer Society Los Alamitos, CA 222-228
- A. Lagana'; Manuali C; N. Faginas Lago; O. Gervasi; S. Crocchianti; (2009). From Computer Assisted to Grid Empowered Teaching and Learning Activities in Higher Chemistry Education, Innovative Methods of Teaching and Learning Chemistry in Higher Education, 153-190
- Appropriate bibliographical support material for all the subjects will be included in advance on the website of the Intensive Course .