

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

Codi	43997
Nom	Dinàmica química i molecular i simulació i modelització per ordinador
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	4 - Modelització Avançada i Aplicacions	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.
- L'estudiant demostra el seu coneixement i comprensió dels fets aplicant conceptes, principis i teories relacionades amb la Química Teòrica i Modelització Computacional.
- L'estudiant coneix teories i mètodes de càlcul associats a processos cinètics i avalua críticament la seua aplicabilitat al càlcul de constants de velocitat.
- L'estudiant està familiaritzat amb les tècniques computacionals que, basades en la mecànica i dinàmica molecular, són la base del disseny de molècules d'interés en camps com ara farmacologia, petroquímica, etc.

2193 - M.ErasMund 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 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.
- L'estudiant demostra el seu coneixement i comprensió dels fets aplicant conceptes, principis i teories relacionades amb la Química Teòrica i Modelització Computacional.
- L'estudiant coneix teories i mètodes de càlcul associats a processos cinètics i avalua críticament la seua aplicabilitat al càlcul de constants de velocitat.
- L'estudiant està familiaritzat amb les tècniques computacionals que, basades en la mecànica i dinàmica molecular, són la base del disseny de molècules d'interés en camps com ara farmacologia, petroquímica, etc.

RESULTATS DE L'APRENTATGE

DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

1.

VOLUM DE TREBALL

ACTIVITAT	Hores	% Presencial
Classes de teoria	56,00	100
Seminaris	7,00	100
Elaboració de treballs individuals	60,00	0
Estudi i treball autònom	66,00	0
Preparació de classes pràctiques i de problemes	36,00	0
TOTAL	225,00	



METODOLOGIA DOCENT

AVALUACIÓ

REFERÈNCIES

Bàsiques

- Juan Andrés, J, Bertran, Eds. (several authors) Theoretical and Computational Chemistry. Foundations, Methods and Techniques. Publicacions de la Universitat Jaume I. Castellon (Spain). 2007
- F. Jensen. Introduction to Computational Chemistry, 2nd Ed. .Wiley, 2007
- A. Szabo, N. Ostlund. Modern Quantum Chemistry. Macmillan. 1982
- G. C. Schatz and M. A. Ratner, editors. Quantum Mechanics in Chemistry . Dover, New York, USA, 2002
- H.-D. Meyer, F. Gatti, and G. A. Worth, editors. M C T D H: Basic Theory, Extensions, and Applications to Multidimensional Quantum Dynamics . VCH, Weinheim, Germany, 2009
- Introduction to quantum mechanics: a time-dependent perspective, by David J. Tannor. 2007. University Science Books.
- Elements of Molecular Dynamics, by W. Smith 2014