

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

Codi	43998
Nom	Aplicacions
Cicle	Màster
Crèdits ECTS	6.0
Curs acadèmic	2021 - 2022

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 demostra el seu coneixement i comprensió dels fets aplicant conceptes, principis i teories relacionades amb la Química Teòrica i Modelització Computacional.
- Adquirir una visió global de les distintes aplicacions de la Química Teòrica i modelització en camps de la Química, Bioquímica, Ciències de Materials, Astrofísica i Catàlisi.
- L'estudiant té capacitat de generar noves idees.
- 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 demostra el seu coneixement i comprensió dels fets aplicant conceptes, principis i teories relacionades amb la Química Teòrica i Modelització Computacional.
- Adquirir una visió global de les distintes aplicacions de la Química Teòrica i modelització en camps de la Química, Bioquímica, Ciències de Materials, Astrofísica i Catàlisi.
- L'estudiant té capacitat de generar noves idees.
- 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	32,00	100
Seminaris	10,00	100
Elaboració de treballs individuals	40,00	0
Estudi i treball autònom	44,00	0
Preparació de classes pràctiques i de problemes	24,00	0
TOTAL	150,00	



METODOLOGIA DOCENT

AVALUACIÓ

REFERÈNCIES

Bàsiques

- 1. R. F. W. Bader, Atoms in Molecules. A Quantum Theory, Clarendon Press, Oxford, 1990.
- 2. A. D. Becke and K. E. Edgecombe, J. Chem. Phys., 1990, 92, 5397-5403.
- 3. A. Savin, R. Nesper, S. Wengert and T. F. Fäsler, Angew. Chem. Int. Ed. Engl., 1997, 36, 1808-1832.
- 4. B. Silvi and A. Savin, Nature, 1994, 371, 683-686.
- 5. A. E. Reed, L. A. Curtiss and F. Weinhold, Chem. Rev., 1988, 88, 899-926.
- 6. M. Alcamí, O. Mó and M. Yáñez, in Molecular Electrostatic Potentials: Concepts and Applications, ed. J. S. Murray and K. Sen, Elsevier, Amsterdam, 1996, vol. 3, pp. 407-456.
- 7. M. D. Sicilia, O. Mo, M. Yanez, J. C. Guillemin, J. F. Gal and P. C. Maria, Eur. J. Mass Spectrom., 2003, 9, 245-255.
- 8. E. R. Johnson, S. Keinan, P. Mori-Sánchez, J. Contreras-García, A. J. Cohen, W. Yang, J. Am. Chem. Soc. 2010, 132(18), 6498-6506.

ADDENDA COVID-19

Aquesta addenda només s'activarà si la situació sanitària ho requereix i previ acord del Consell de Govern