

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

|                      |                                                    |
|----------------------|----------------------------------------------------|
| <b>Codi</b>          | 43999                                              |
| <b>Nom</b>           | Aprofundiment en els mètodes de la química teòrica |
| <b>Cicle</b>         | Màster                                             |
| <b>Crèdits ECTS</b>  | 5.0                                                |
| <b>Curs acadèmic</b> | 2019 - 2020                                        |

**Titulació/titulacions**

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

**Matèries**

| <b>Titulació</b>                                                   | <b>Matèria</b>  | <b>Caràcter</b> |
|--------------------------------------------------------------------|-----------------|-----------------|
| 2184 - M.U. en Química Teòrica i Modelització Computacional 13-V.1 | 5 - Optativitat | Optativa        |

**Coordinació**

| <b>Nom</b>                           | <b>Departament</b>   |
|--------------------------------------|----------------------|
| 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 és capaç de resoldre problemes i prendre decisions.
- L'estudiant és organitzat en el treball i sap gestionar el temps.
- L'estudiant demostra el seu coneixement i comprensió dels fets aplicant conceptes, principis i teories relacionades amb la Química Teòrica i Modelització Computacional.
- Comprendre els fonaments teòrics i pràctics de tècniques amb les que pot analitzar l'estructura electrònica, morfològica i estructural d'un compost.
- L'estudiant entén els principis bàsics de les metodologies "ab initio" i Teoria dels Funcionals de la Densitat.
- L'estudiant és capaç de discernir entre els diferents mètodes existents i com seleccionar el més adequat per a cada problema.

## RESULTATS DE L'APRENENTATGE

**DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS**

1.

**VOLUM DE TREBALL**

| ACTIVITAT                                       | Hores         | % Presencial |
|-------------------------------------------------|---------------|--------------|
| Classes de teoria                               | 20,00         | 100          |
| Seminaris                                       | 15,00         | 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            |
| <b>TOTAL</b>                                    | <b>125,00</b> |              |

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

- F. Jensen, Introduction to Computational Chemistry, John Wiley & Sons, Chichester, 1999
- D. B. Cook, Handbook of Computational Quantum Chemistry, Oxford University Press, Oxford, 1998
- A. Szabo and N. S. Ostlund, Modern Quantum Chemistry, Dover publications Mineola, 1996
- T. Helgaker and P. R. Taylor, Gaussian basis sets and molecular integrals, World Scientific, Singapore, 1995
- D. R. Yarkony (Ed.) Direct Methods in Electronic Structure Theory, Vol. part I, World Scientific, Sinapore, 1995
- Helgaker, T., Jørgensen, P., Olsen, J.; Molecular Electronic-Structure Theory. John Wiley & Sons Ltd, 2000.
- Roos, B. Editor; Lecture notes in quantum chemistry: European summer school in quantum chemistry. Springer-Verlag 1994. Chapters on CC, CI, MCSCF, calibration.



Robert G. Parr and Weitao Yang: Density Functional Theory for Atoms and Molecules. Oxford University Press, 1994.

A. J. Cohen, P. Mori-Sánchez and W. Yang, Challenges for Density Functional Theory, Chemical Reviews, 112, 208 (2012).

Dreizler and Gross, Density Functional Theory: An approach to the quantum many-body problem, Springer-Verlag (1990)

Axel Becke, Perspective: Fifty years of density-functional theory in chemical physics J. Chem. Phys. 140, 18A301 (2014)

## **ADDENDA COVID-19**

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