

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

Codi	44001
Nom	Estats Excitats
Cicle	Màster
Crèdits ECTS	5.0
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	1	Anual

Matèries

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

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 posseïx capacitat d'anàlisi i síntesi.
- Comprendre els fonaments teòrics i pràctics de tècniques amb les que pot analitzar l'estructura electrònica, morfològica i estructural d'un compost.

RESULTATS DE L'APRENTATGE

El curs pretén familiaritzar als estudiants amb el tractament d'estats excitats, tant rovibracionals com a electrònics. Al final del curs l'estudiant coneixerà els fonaments dels mètodes i serà capaç de manejar els programes d'ús més freqüent per al tractament d'estats excitats.

DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

1.



2.

3.

4.

5.

6.

7.

8.

VOLUM DE TREBALL

ACTIVITAT	Hores	% Presencial
Classes de teoria	35,00	100
Elaboració de treballs individuals	40,00	0
Estudi i treball autònom	50,00	0
TOTAL	125,00	

METODOLOGIA DOCENT

AVALUACIÓ

REFERÈNCIES



Bàsiques

- A. Requena y J. Zúñiga, Espectroscopía (Pearson Education, Madrid, 2004).
P.F. Bernath, Spectra of Atoms and Molecules (Oxford University Press, Nueva York, 1995).
J. L. McHale, Molecular Spectroscopy (Prentice Hall, New Jersey, 1999).
J. I. Steinfeld, Molecules and Radiation (The MIT Press, Cambridge, 1989).
W. S. Struve, Fundamentals of Molecular Spectroscopy (Wiley, Nueva York, 1989).
S. Svanberg, Atomic and Molecular Spectroscopy (Springer-Verlag, Berlín, 2001).
J. M. Hollas, Modern Spectroscopy (Wiley, Chichester, 1996).
- I. N. Levine, Molecular Spectroscopy (Wiley, 1980)
C.A. Ullrich, Time-Dependent Density-Functional Theory: Concepts and Applications (Oxford University Press, USA, 2012).
D. Marx and J. Hutter, Ab Initio Molecular Dynamics: Basic Theory and Advanced Methods, 1st ed. (Cambridge University Press, Cambridge, 2009).
D.J. Tannor, Introduction to Quantum Mechanics: A Time-Dependent Perspective (University Science Books, 2006).
edited by M.A.L. Marques, C.A. Ullrich, F. Nogueira, A. Rubio, K. Burke, and E.K.U. Gross, Time-Dependent Density Functional Theory, 1st ed. (Springer, 2006).
M.A.L. Marques and E.K.U. Gross, Annual Review of Physical Chemistry 55, 427-455 (2004).
P.W. Brumer and M. Shapiro, Principles of the Quantum Control of Molecular Processes, illustrated ed. (Wiley-Interscience, 2003).
L. Serrano-Andrés and M. Merchán, Spectroscopy: Applications in Encyclopedia of Computational Chemistry (John Wiley & Sons, Ltd, 2004).
S.A. Rice and M. Zhao, Optical Control of Molecular Dynamics, 1st ed. (Wiley-Interscience, 2000).
- edited by B.O. Roos, Lecture Notes in Quantum Chemistry II: European Summer School in Quantum Chemistry, 1st ed. (Springer-Verlag, 1994).
E.K.U. Gross, J.F. Dobson and M. Petersilka, in Density Functional Theory II, edited by R. Nalewajski (Springer Berlin / Heidelberg, 1996), pp. 81-172.
N.J. Turro, Modern Molecular Photochemistry (University Science Books, Mill Valley, California, 1991).
B.O. Roos, Ab initio methods in quantum chemistry II in Advances in Chemical Physics, edited by K. P. Lawley (John Wiley & Sons, Inc., 1987), pp. 399-445.
edited by M. Olivucci, Computational Photochemistry (Elsevier, Amsterdam, 2005).