

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

Codi	44002
Nom	Sòlids
Cicle	Màster
Crèdits ECTS	5.0
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	1	Primer quadrimestre

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.
- 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.
- 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'APRENENTATGE

DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

1.

**VOLUM DE TREBALL**

ACTIVITAT	Hores	% Presencial
Classes de teoria	50,00	100
Elaboració de treballs individuals	30,00	0
Estudi i treball autònom	45,00	0
TOTAL	125,00	

METODOLOGIA DOCENT**AVALUACIÓ**

--

REFERÈNCIES**Bàsiques**

- [01] L. Kantorovich, "Quantum Theory of the Solid State" (Kluwer, Dordrecht, The Netherlands, 2004).
- [02] R. M. Martin, "Electronic Structure: Basic theory and practical methods" (Cambridge UP, Cambridge, UK, 2004).
- [03] E. Kaxiras, "Atomic and Electronic Structure of Solids" (Cambridge UP, Cambridge, UK, 2003).
- [04] O. Anderson, "Equations of State for Solids in Geophysics and Ceramic Science" (Oxford UP, Oxford, UK, 1995).
- [05] A. Otero-de-la-Roza and V. Luaña, "Equations of state and thermodynamics of solids using empirical corrections in the quasiharmonic approximation", Phys. Rev. B 84 (2011) 024109.
- [06] A. R. Oganov, Ed, "Modern methods of crystal structure prediction" (Wiley-VCH, 2011).
- [07] J. P. Poirier, "Introduction to the Physics of the Earth's Interior" (Cambridge UP, Cambridge, UK, 2000).
- [08] B. Bersuker, "The Jahn-Teller effect" (Cambridge UP, Cambridge, UK, 2006).
- [09] E. R. Johnson, S. Keinan, P. Mori-Sanchez, J. Contreras-Garcia, A. J. Cohen, and W. Yang, Revealing Noncovalent Interactions, J. Am. Chem. Soc. 132 , 6498 (2010)
- [10] B. Silvi, A. Savin, Classification of chemical bonds based on the topological analysis of electron localization functions, Nature 371, 683 (1994)
- [11] J. Contreras-Garcia, A. M. Pendas, B. Silvi, J. M. Recio, Computation of local and global properties of the ELF topology in crystals, J. Theor. Chem. Comp. 113, 1068 (2009)
- [12] A. Otero-de-la-Roza, J. Contreras-Garcia, E. R. Johnson, Revealing non-covalent interactions in solids, NCI plots revisited Phys. Chem. Chem. Phys. 14, 12165 (2012)
- [13] P. García-Fernández, J. Wojdel, J. Iñiguez and J. Junquera Second-principles method for materials simulations including electron and lattice degrees of freedom Phys. Rev. B 93, 195137 (2016)



- [14] M. S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, A. Jorio Group Theory: Applications to the Physics of Condensed Matter (Springer, 2007)
- [15] J.L. Whitten and H. Yang, Theory of Chemisorption and reactions on metal surfaces Surf. Sci. rep. 24, 59 (1996)
- [16] A. R. Leach, "Molecular modeling" (Prentice Hall, 2001).
- [17] T. Schlick, "Molecular modeling and simulation" (Springer, 2002).
- [18] D. Marx and J. Hutter, "Ab initio molecular dynamics: Theory and implementation", in "Modern methods and algorithms on quantum chemistry" by J. Grotendorst (Ed.), (John von Neumann Institute, NIC series vol. 1 & 3, 2000).
- [19] C. Fiolhais, F. Nogueira and M. A. L. Marques, Eds. "A Primer in Density Functional Theory", (Springer, Heidelberg, 2003).
- [20] R. Dronskowski "Computational Chemistry of Solid State Materials" (Wiley-VCH, 2005).
- [21] P. Huang, and E. A. Carter, "Advances in Correlated Electronic Structure Methods for Solids, Surfaces and Nanostructures", Ann. Rev. Phys. Chem. 59 (2008) 261.
- [22] G. Pacchioni, A. M. Ferrari, A. M. Márquez, and F. Illas, "Importance of Madelung Potential in Quantum Chemical Modeling of Ionic Surfaces", J. Comput. Chem. 18 (1997) 617.
- [23] J. N. Norskov, F. Abild-Pedersen, F. Studt, and T. Bligaard "Density functional theory in surface chemistry and catalysis" PNAS 108 (2011) 937-943.
- [24] F. Yang, J. Graciani, J. Evans, P. Liu, J. Hrbek, J. Fernández. Sanz, and J. A. Rodríguez, "CO oxidation on inverse CeOx/Cu(111) Catalysts: High catalytic activity and ceria-promoted dissociation of O₂", J. Am. Chem. Soc. 133 (2011) 3444.
- [25] C. de Graaf, R. Broer, Magnetic Interactions in Molecules and Solids Second volume of the textbooks of the TCCM Master. (Springer 2015).
- [26] J. P. Malrieu, R. Caballol, C. J. Calzado, C. de Graaf, N. Guihéry Magnetic Interactions in Molecules and Highly Correlated Materials: Physical Content, Analytical Derivation, and Rigorous Extraction of Magnetic Hamiltonians, Chemical Reviews 114, 429-492 (2014).

ADDENDA COVID-19

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