

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

Codi	44004
Nom	Laboratori de química teòrica aplicada
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	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****RESULTATS DE L'APRENTATGE****DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS**

1.

VOLUM DE TREBALL

ACTIVITAT	Hores	% Presencial
Classes de teoria	40,00	100
Tutories reglades	10,00	100
Elaboració de treballs individuals	30,00	0
Estudi i treball autònom	45,00	0
TOTAL	125,00	

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

- . Consulta de documentació actualitzada en línia en llenguajes de programació y aplicaciones: Python: www.python.org
- B. Foreman y E. Frisch, Exploring chemistry with Electronic Structure Methods. 2nd Edition. Gaussian, Inc. Pittsburgh, 1996.
- MOLCAS v. 7.8 Users manual, Lund University, 2012.
- Charles Kittel Introduction to solid state physics
- Neil W. Ashcroft and N. David Mermin Solid state physics



- 1. Mopac manual: <http://openmopac.net/manual/>
- L. Sun and W. Hase, Born-Oppenheimer Direct Dynamics Classical Trajectory Simulations.
- Neil W. Ashcroft and N. David Mermin Solid state physics
- Gaussian manual www.gaussian.com

ADDENDA COVID-19

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