

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

Codi	44971
Nom	Mecànica estadística i aplicacions en simulació
Cicle	Màster
Crèdits ECTS	5.0
Curs acadèmic	2022 - 2023

Titulació/titulacions

Titulació	Centre	Curs	Període
2245 - Màster Universitari Erasmus Mundus en Química Teòrica i Modelització Comp.	Facultat de Química	1	Anual

Matèries

Titulació	Matèria	Caràcter
2245 - Màster Universitari Erasmus Mundus en Química Teòrica i Modelització Comp.	1 - Fonaments	Obligatòria

Coordinació

Nom	Departament
TUÑÓN 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 (RD 1393/2007) // RESULTATS DE L'APRENTATGE (RD 822/2021)

2245 - Màster Universitari Erasmus Mundus en Química Teòrica i Modelització Comp.

- 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.
- L'estudiant comprén la base de la Mecànica Estadística formulada a partir de les col·lectivitats.
- Els estudiants són capaços de resoldre problemes i prendre decisions de qualsevol índole davall el compromís amb la defensa i pràctica de les polítiques d'igualtat.
- El/la estudiant és capaç d'adaptar-se a diferents entorns culturals demostrant que respon al canvi amb flexibilitat.
- Comprén els fonaments teòrics i pràctics de tècniques computacionals amb què pot analitzar l'estructura electrònica, morfològica i estructural d'un compost i interpreta adequadament els resultats.
- Sap calcular funcions de partició i aplica estadística quàntiques i clàssica als sistemes ideals d'interés en Química.

**RESULTATS D'APRENTATGE (RD 1393/2007) // SENSE CONTINGUT (RD 822/2021)****DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS**

1.

2.

VOLUM DE TREBALL

ACTIVITAT	Hores	% Presencial
Classes de teoria	25,00	100
Seminaris	10,00	100
TOTAL	35,00	

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

- Theoretical and Computational Chemistry: Foundations, Methods and Techniques. J. Andrés y J. Bertrán. Eds. Publ. Univ. Jaime I (Castellón) 2007.

Chandler, D., "Introduction to Modern Statistical Mechanics", (Oxford University Press, London, 1986).

Hill, T. L., An Introduction to Statistical Thermodynamics (Dover, New York) 1986.

McQuarrie, D. A., Statistical Mechanics, (Harper and Row, New York) 1976.

Toda, M., Kubo, R., Saito, N., "Statistical Physics I, (Springer-Verlag, Heidelberg) 1992.

Frenkel, D, Smit, B., Understanding Molecular Simulation (Academic Press, San Diego), 2002.