

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

Codi	44975
Nom	Mètodes de la química teòrica II
Cicle	Màster
Crèdits ECTS	5.0
Curs acadèmic	2022 - 2023

Titulació/titulacions

Titulació	Centre	Curs	Període
2245 - M.ErasmMund en Química Teòrica i Modelització Computacional	Facultat de Química	1	Anual

Matèries

Titulació	Matèria	Caràcter
2245 - M.ErasmMund en Química Teòrica i Modelització Computacional	2 - Mètodes	Obligatòria

Coordinació

Nom	Departament
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

2245 - M.ErasmMund en Química Teòrica i Modelització Computacional

- 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 està familiaritzat amb els postulats fonamentals de la Mecànica Quàntica necessaris per a un bon enteniment dels mètodes més comuns utilitzats en química quàntica.
- 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.
- El/la estudiant és capaç de discernir entre els diferents mètodes existents i com seleccionar el més adequat per a cada problema.

RESULTATS DE L'APRENTATGE



DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

1.

2.

3.

4.

5.

6.

7.

8.

9.

**VOLUM DE TREBALL**

ACTIVITAT	Hores	% Presencial
Classes de teoria	20,00	100
Seminaris	15,00	100
TOTAL	35,00	

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

- M. P. Allen, D. J. Tildesley. Computer Simulation of Liquids. Oxford University Press, New York 1989
- A. R. Leach. Molecular Modelling. Longman, London, 1996
- D. Frenkel & B. Smit. Understanding Molecular Simulation. Academic Press, San Diego, 1996
- A. Stone. The Theory of Intermolecular Forces. Oxford University Press, 2013