

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

Codi	44981
Nom	Laboratori de química teòrica aplicada
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	3 - Optatives de primer	Optativa

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.
- 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 organitzat en el treball demostrant que sap gestionar el temps i els recursos de què disposa.
- El/la estudiant posseïx capacitat d'anàlisi i síntesi de tal forma que puga comprendre, interpretar i avaluar la informació rellevant assumint amb responsabilitat el seu propi aprenentatge o, en el futur, la identificació d'eixides professionals i jaciments d'ocupació.

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 documentación actualizada en línea en lenguajes de programación 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