

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

|                      |                                                                               |
|----------------------|-------------------------------------------------------------------------------|
| <b>Codi</b>          | 44984                                                                         |
| <b>Nom</b>           | Mètodes avançats en estructura electrònica, dinàmica i modelització molecular |
| <b>Cicle</b>         | Màster                                                                        |
| <b>Crèdits ECTS</b>  | 12.0                                                                          |
| <b>Curs acadèmic</b> | 2022 - 2023                                                                   |

**Titulació/titulacions**

| <b>Titulació</b>                                                   | <b>Centre</b>       | <b>Curs</b> | <b>Període</b> |
|--------------------------------------------------------------------|---------------------|-------------|----------------|
| 2245 - M.ErasmMund en Química Teòrica i Modelització Computacional | Facultat de Química | 2           | Anual          |

**Matèries**

| <b>Titulació</b>                                                   | <b>Matèria</b>                      | <b>Caràcter</b> |
|--------------------------------------------------------------------|-------------------------------------|-----------------|
| 2245 - M.ErasmMund en Química Teòrica i Modelització Computacional | 5 - Mètodes i modelització avançats | Obligatòria     |

**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 sàpiguin 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 sàpiguem 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 entén els principis bàsics de les metodologies "ab initio" i Teoria dels Funcionals de la Densitat.
- Conèixer i avaluar críticament l'aplicabilitat dels mètodes avançats de la Química Quàntica als sistemes cuasidegenerados, com ara, sistemes amb metalls de transició o estats excitats (la seua espectroscòpia i reactivitat) .
- Conèixer les teories i els mètodes de càlcul per a l'estudi de sòlids i superfícies; avaluació crítica de la seua aplicabilitat a problemes de catàlisi, magnetisme, conductivitat, etc.
- Els estudiants desenvolupen un pensament i raonament crític i saben comunicar-los de manera igualitària i no sexista tant en forma oral com escrita, en la seua llengua pròpia i en una llengua estrangera.

## RESULTATS DE L'APRENENTATGE

## DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

1.

2.

**VOLUM DE TREBALL**

| ACTIVITAT                      | Hores        | % Presencial |
|--------------------------------|--------------|--------------|
| Classes de teoria              | 40,00        | 100          |
| Pràctiques en aula informàtica | 30,00        | 100          |
| Seminaris                      | 10,00        | 100          |
| Tutories reglades              | 10,00        | 100          |
| <b>TOTAL</b>                   | <b>90,00</b> |              |

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

- F Weinhold, C. R. Landis. Valency and Bonding: A Natural Bond Orbital DonorAcceptor Perspective. (Cambridge Univ. Press. 2005)
- R. F. W. Bader. Atoms in Molecules. A quantum theory. /Cambridge Univ. Press. 1990).
- B. Silvi, A. Savin, Nature 371, 1994, 683.
- C. Gatti, P. Macchi, Eds. Modern Charge Density Analysis. (Springer 2012).
- Attila Szabo and Neil S. Ostlund, Modern Quantum Chemistry (Macmillan Publishing Co., Inc., 1982).
- Trygve U. Helgaker, Poul Jorgensen, and Jeppe Olsen, Molecular Electronic-Structure Theory (John Wiley & Sons Inc., Chichester, 2000).
- J. Stone The Theory of Intermolecular Forces, Oxford University Press, 2º Ed. UK. 2013.
- Computer simulations of liquids, M.P. Allen and D.J. Tildesley, (Oxford Science Publications, 2000).
- D. Marx, and J. Hutter, Ab Initio Molecular Dynamics: Theory and Implementation in Modern Methods and Algorithms of Quantum Chemistry (J. Grotendorst Ed., John von Neumann Institute for Computing, Julich, NIC Series, Vol. 1, pp. 301-449, 2000).