

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

Codi	44987
Nom	Mètodes teòrics per a la simulació de materials
Cicle	Màster
Crèdits ECTS	6.0
Curs acadèmic	2022 - 2023

Titulació/titulacions

Titulació	Centre	Curs	Període
2245 - M.ErasmMund en Química Teòrica i Modelització Computacional	Facultat de Química	2	Anual

Matèries

Titulació	Matèria	Caràcter
2245 - M.ErasmMund en Química Teòrica i Modelització Computacional	4 - Optatives de segon	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 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.
- L'estudiant demostra el seu coneixement i comprensió dels fets aplicant conceptes, principis i teories relacionades amb la Química Teòrica i Modelització Computacional.
- Ampliar i/o adquirir coneixement dels mètodes bàsics de la Química Quàntica i avaluar críticament la seua aplicabilitat.
- L'estudiant està familiaritzat amb les tècniques computacionals que, basades en la mecànica i dinàmica molecular, són la base del disseny de molècules d'interés en camps com ara farmacologia, petroquímica, etc.
- Conèixer l'existència de tècniques computacionals avançades com ara: canalització d'instruccions i dades, processadors superescalar i multiescalares, operacions en cadena, plataformes en paral·lel, etc.
- 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.
- Els estudiants són capaços de treballar en equip tant a nivell multidisciplinari com amb els seus propis parixes respectant el principi d'igualtat d'home i dones.
- El/la estudiant és organitzat en el treball demostrant que sap gestionar el temps i els recursos de què disposa.
- El/la estudiant té capacitat de generar noves idees a partir de les seues pròpies decisions.

RESULTATS DE L'APRENTATGE

DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS



1.

2.

VOLUM DE TREBALL

ACTIVITAT	Hores	% Presencial
Pràctiques en aula informàtica	20,00	100
Classes de teoria	20,00	100
Tutories reglades	5,00	100
TOTAL	45,00	

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

- A Computational Chemistry of Solid State Materials. Ronald Holffmann. Wiley-VCH.
- Electronic structure. Basic Theory and Practical Methods. Richard M. Martin.
- Fundamentals of Condensed Matter Physics. Marvin L. Cohen and Steven G. Louie.