

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

Codi	44989
Nom	De la teoria a la implementació: tutorials en química teòrica
Cicle	Màster
Crèdits ECTS	6.0
Curs acadèmic	2021 - 2022

Titulació/titulacions

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

Matèries

Titulació	Matèria	Caràcter
2245 - M.U. EM 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 (RD 1393/2007) // RESULTATS DE L'APRENTATGE (RD 822/2021)****2245 - M.U. EM 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.
- 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 manegen les tècniques més usuals de programació en física i en química i està familiaritzat amb les ferramentes de càlcul essencials en estes àrees.
- L'estudiant és capaç de desenrotllar programes eficients en Fortran a fi d'utilitzar les dites ferramentes en el seu treball quotidià.
- L'estudiant entén els principis bàsics de les metodologies "ab initio" i Teoria dels Funcionals de la Densitat.
- 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 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 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 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.
- El/la estudiant és capaç d'adaptar-se a diferents entorns culturals demostrant que respon al canvi amb flexibilitat.
- 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.
- El/la estudiant té capacitat de generar noves idees a partir de les seues pròpies decisions.
- El/la estudiant és capaç de discernir entre els diferents mètodes existents i com seleccionar el més adequat per a cada problema.

RESULTATS D'APRENTATGE (RD 1393/2007) // SENSE CONTINGUT (RD 822/2021)

**DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS**

1.

VOLUM DE TREBALL

ACTIVITAT	Hores	% Presencial
Pràctiques en aula informàtica	20,00	100
Tutories reglades	10,00	100
Classes de teoria	10,00	100
Seminaris	5,00	100
TOTAL	45,00	

METODOLOGIA DOCENT**AVALUACIÓ****REFERÈNCIES****ADDENDA COVID-19**

Aquesta addenda només s'activarà si la situació sanitària ho requereix i previ acord del Consell de Govern