

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

Codi	44990
Nom	Modelització d'estructura electrònica
Cicle	Màster
Crèdits ECTS	6.0
Curs acadèmic	2022 - 2023

Titulació/titulacions

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

Matèries

Titulació	Matèria	Caràcter
2245 - M.ErasMund 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 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.
- 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.
- El/la estudiant és capaç de discernir entre els diferents mètodes existents i com seleccionar el més adequat per a cada problema.
- Els estudiants comprenen i manegen les ferramentes matemàtiques requerides per al desenvolupament de la Química Teòrica en els seus aspectes fonamentals i les seues aplicacions.

RESULTATS DE L'APRENTATGE

DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

1.



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

- Engel, T. y Reid, P., Quantum Chemistry and Spectroscopy, Prentice Hall, 2006.

Levine, I., Quantum Chemistry, 5^a Ed., Prentice Hall, 2000.

Foresman, J.B. y Frisch, A., Exploring chemistry with electronic structure methods, 2^a Ed., Gaussian, 1996.