

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

Codi	44993
Nom	Treball fi de màster
Cicle	Màster
Crèdits ECTS	30.0
Curs acadèmic	2021 - 2022

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	6 - Treball fi de màster	Treball Fi Estudis

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 sàpiguem 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.
- 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.
- Adquirir una visió global de les distintes aplicacions de la Química Teòrica i modelització en camps de la Química, Bioquímica, Ciències de Materials, Astrofísica i Catàlisi.
- Ser capaç de realitzar una contribució a través d'una investigació original que amplie les fronteres del coneixement en simulació Química, desenrotllant un corpus substancial, que meresca, almenys en part, la publicació referenciada a nivell nacional.
- L'estudiant està familiaritzat amb els postulats fonamentals de la Mecànica Quàntica necessaris per a un bon enteniment dels mètodes més comuns utilitzats en química quàntica.
- 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 coneix teories i mètodes de càlcul associats a processos cinètics i avalua críticament la seua aplicabilitat al càlcul de constants de velocitat.
- 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 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) .



- Conéixer 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.
- Conéixer 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.
- 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 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 té capacitat de generar noves idees a partir de les seues pròpies decisions.
- Maneja les principals fonts d'informació científica relacionades amb la Química Teòrica i Modelització Computacional, sent capaç de buscar informació rellevant en química en pàgines web de dades estructurals, de dades experimentals químic físic, en les bases de dades de càlculs moleculars, en bases de dades bibliogràfiques i en la lectura crítica de treballs científics.
- Comprén els fonaments teòrics i pràctics de tècniques computacionals amb què pot analitzar l'estructura electrònica, morfològica i estructural d'un compost i interpreta adequadament els resultats.
- Sap calcular funcions de partició i aplica estadística quàntiques i clàssica als sistemes ideals d'interés en Química.
- El/la estudiant posseïx la base matemàtica necessària per al correcte tractament de la simetria en àtoms, molècules i sòlids, amb èmfasi en les possibles aplicacions.
- 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

VOLUM DE TREBALL

ACTIVITAT	Hores	% Presencial
Treball final de grau/màster		100
Seguiment i tutorització del Treball Fi de Màster	295,00	100
Presentació i defensa del Treball Fi de Màster	5,00	100
Realització del Treball Fi de Màster	450,00	0
TOTAL	750,00	

METODOLOGIA DOCENT

AVALUACIÓ

REFERÈNCIES

Bàsiques

- Lectures suggested by tutor.

ADDENDA COVID-19

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