

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

Codi	44983
Nom	Bioquímica computacional
Cicle	Màster
Crèdits ECTS	5.0
Curs acadèmic	2022 - 2023

Titulació/titulacions

Titulació	Centre	Curs	Període
2245 - M.ErasmMund en Química Teòrica i Modelització Computacional	Facultat de Química	1	Anual

Matèries

Titulació	Matèria	Caràcter
2245 - M.ErasmMund en Química Teòrica i Modelització Computacional	3 - Optatives de primer	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 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.
- 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.
- 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 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.
- 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.

RESULTATS DE L'APRENTATGE

DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

1.

VOLUM DE TREBALL

ACTIVITAT	Hores	% Presencial
Pràctiques en laboratori	20,00	100
Classes de teoria	20,00	100
Tutories reglades	10,00	100
Elaboració de treballs individuals	16,00	0
Estudi i treball autònom	59,00	0
TOTAL	125,00	

METODOLOGIA DOCENT

AVALUACIÓ

REFERÈNCIES

Bàsiques

- Molecular Modeling and Simulation: An Interdisciplinary Guide
Tamar Schlick
Springer
- Understanding Molecular Simulation, Second Edition: From Algorithms to Applications
Daan Frenkel
Academic Press



- Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models
Chris Cramer
Wiley

