

**FICHA IDENTIFICATIVA****Datos de la Asignatura**

<b>Código</b>	44990
<b>Nombre</b>	Modelización de estructura electrónica
<b>Ciclo</b>	Máster
<b>Créditos ECTS</b>	6.0
<b>Curso académico</b>	2021 - 2022

**Titulación(es)**

<b>Titulación</b>	<b>Centro</b>	<b>Curso</b>	<b>Periodo</b>
2245 - M.ErasmMund en Química Teórica y Modelización Computacional	Facultad de Química	2	Anual

**Materias**

<b>Titulación</b>	<b>Materia</b>	<b>Caracter</b>
2245 - M.ErasmMund en Química Teórica y Modelización Computacional	4 - Optativas de segundo	Optativa

**Coordinación**

<b>Nombre</b>	<b>Departamento</b>
TUÑÓN GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO	315 - Química Física

**RESUMEN****CONOCIMIENTOS PREVIOS****Relación con otras asignaturas de la misma titulación**

No se han especificado restricciones de matrícula con otras asignaturas del plan de estudios.

**Otros tipos de requisitos**



## COMPETENCIAS

### 2245 - M.ErasmMund en Química Teórica y Modelización Computacional

- Que los/las estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.
- Que los/las estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo
- Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación.
- Los estudiantes deben ser capaces de fomentar, en contextos académicos y profesionales, el avance tecnológico y científico dentro de una sociedad basada en el conocimiento y en el respeto a: a) los derechos fundamentales y de igualdad de oportunidades entre hombres y mujeres, b) los principios de igualdad de oportunidades y accesibilidad universal de las personas con discapacidad y c) los valores propios de una cultura de paz y de valores democráticos.
- El estudiante entiende los principios básicos de las metodologías "ab initio" y Teoría de los Funcionales de la Densidad.
- Los estudiantes son capaces de resolver problemas y tomar decisiones de cualquier índole bajo el compromiso con la defensa y práctica de las políticas de igualdad.
- El/la estudiante es organizado en el trabajo demostrando que sabe gestionar el tiempo y los recursos de que dispone.
- El/la estudiante posee capacidad de análisis y síntesis de tal forma que pueda comprender, interpretar y evaluar la información relevante asumiendo con responsabilidad su propio aprendizaje o, en el futuro, la identificación de salidas profesionales y yacimientos de empleo.
- El/la estudiante es capaz de discernir entre los diferentes métodos existentes y cómo seleccionar el más adecuado para cada problema.
- Los estudiantes comprenden y manejan las herramientas matemáticas requeridas para el desarrollo de la Química Teórica en sus aspectos fundamentales y sus aplicaciones.

## RESULTADOS DE APRENDIZAJE

Este curso se impartirá en la Universidad Sorbona de Paris, socia del Erasmus Mundus, e introducirá el estudio de, diferentes modelos desde la micro a la meso escala, para tratar sistemas biológicos complejos.

## DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS

**1.**

1. Introducción a la computación Meso-Bio-Nano (MBN).
2. Enfoque teórico para simulaciones multiescala por ordenador.
3. Modelización computacional de sistemas MBN.
4. Sistemas biomoleculares.

**VOLUMEN DE TRABAJO**

ACTIVIDAD	Horas	% Presencial
Prácticas en aula informática	20,00	100
Clases de teoría	20,00	100
Tutorías regladas	5,00	100
<b>TOTAL</b>	<b>45,00</b>	

**METODOLOGÍA DOCENTE****EVALUACIÓN****Convocatoria ordinaria**

La nota final de la asignatura se basará en: 20% examen final de la asignatura y un 80% correspondiente a la entrega de un informe de ejercicios propuestos por el profesor.

**Convocatoria extraordinaria**

La nota se basará en la realización de un informe con los ejercicios propuestos.

**REFERENCIAS****Básicas**



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

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

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

## ADENDA COVID-19

Esta adenda solo se activará si la situación sanitaria lo requiere y previo acuerdo del Consejo de Gobierno