

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

Código	44990
Nombre	Modelización de estructura electrónica
Ciclo	Máster
Créditos ECTS	6.0
Curso académico	2022 - 2023

Titulación(es)

Titulación	Centro	Curso	Periodo
2245 - Máster Universitario Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelizac. Comput.	Facultad de Química	2	Anual

Materias

Titulación	Materia	Carácter
2245 - Máster Universitario Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelizac. Comput.	4 - Optativas de segundo	Optativa

Coordinación

Nombre	Departamento
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 (RD 1393/2007) // RESULTADOS DEL APRENDIZAJE (RD 822/2021)

2245 - Máster Universitario Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelizac. Comput.

- 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 (RD 1393/2007) // SIN CONTENIDO (RD 822/2021)

Este curso se impartirá en la Universidad Sorbona de París, 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
TOTAL	45,00	

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.