FICHA IDENTIFICATIVA

Datos de la Asignatura

Código	44991
Nombre	Modelización multiescala de sistemas moleculares complejos
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
TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO	315 - Química Física

RESUMEN

El objetivo principal de este curso es cubrir los métodos modernos de la teoría de la estructura electrónica "ab initio", para investigar las propiedades de la materia condensada en estado de tierra, perturbador y excitado. Esto se logrará mediante clases y ejercicios (TD), incluidos los numéricos. Empezaremos con la teoría de Fermi del electrón-gas, para desarrollar los fundamentos de la Teoría Funcional de la Densidad (DFT), el marco principal y punto de partida de los métodos modernos de estructura electrónica. Evaluaremos su extensión, sus principales aproximaciones, su desarrollo operativo y sus principales aplicaciones en la determinación de las propiedades estructurales, electrónicas y magnéticas de la materia en el estado terrestre.

El curso será organizado por la Universidad Sorbona.

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 posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo
- 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.
- Los estudiantes manejan las técnicas más usuales de programación en física y en química y está familiarizado con las herramientas de cálculo esenciales en estas áreas.
- El estudiante está familiarizado con las técnicas computacionales que, basadas en la mecánica y dinámica molecular, son la base del diseño de moléculas de interés en campos tales como farmacología, petroquímica, etc.
- Conocer la existencia de técnicas computacionales avanzadas tales como: canalización de instrucciones y datos, procesadores superescalar y multiescalares, operaciones en cadena, plataformas en paralelo, etc.
- 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.
- Los estudiantes son capaces de trabajar en equipo tanto a nivel multidisciplinar como con sus propios pares respetando el principio de igualdad de hombre y mujeres.
- Los estudiantes desarrollan un pensamiento y razonamiento crítico y saben comunicarlos de manera igualitaria y no sexista tanto en forma oral como escrita, en su lengua propia y en una lengua extranjera.

RESULTADOS DE APRENDIZAJE (RD 1393/2007) // SIN CONTENIDO (RD 822/2021)

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 evaluación se basará en la entrega de un informe con los ejercicios propuestos.

REFERENCIAS

Básicas

- Goldstein, Herbert; Poole, Charles; Safko, John. Classical mechanics. 3rd. San Francisco: Addison-Wesley, 2001.

  Lebon, G.; Jou i Mirabent, David; Casas-Vázquez, José. Understanding non-equilibrium thermodynamics: foundations, applications, frontiers. Berlin: Springer, 2008.

Reichl, L. E. Introduction to modern statistical physics. 3rd rev. and updated ed. Weihheim: Wiley, 2009.

Sakurai, J. J. ; Napolitano, Jim. Modern quantum mechanics. 2nd ed., international ed. Essex (England): Pearson, 2014.