

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

Codi	44991
Nom	Modelització multiescala de sistemes moleculars complexos
Cicle	Màster
Crèdits ECTS	6.0
Curs acadèmic	2022 - 2023

Titulació/titulacions

Titulació	Centre	Curs	Període
2245 - M.U. EM Química Teòrica i Modelització Computacional	Facultat de Química	2	Anual

Matèries

Titulació	Matèria	Caràcter
2245 - M.U. EM Química Teòrica i Modelització Computacional	4 - Optatives de segon	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 (RD 1393/2007) // RESULTATS DE L'APRENTATGE (RD 822/2021)****2245 - M.U. EM Química Teòrica i Modelització Computacional**

- 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.
- 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.
- 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 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 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.

RESULTATS D'APRENTATGE (RD 1393/2007) // SENSE CONTINGUT (RD 822/2021)**DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS****1.**

**VOLUM DE TREBALL**

ACTIVITAT	Hores	% Presencial
Pràctiques en aula informàtica	20,00	100
Classes de teoria	20,00	100
Tutories reglades	5,00	100
TOTAL	45,00	

METODOLOGIA DOCENT**AVALUACIÓ****REFERÈNCIES****Bàsiques**

- 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. Weinheim: Wiley, 2009.

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