



## 33428 - MODELIZACIÓN DE ESTRUCTURA ELECTRÓNICA

### Información de la asignatura

**Código - Nombre:** 33428 - MODELIZACIÓN DE ESTRUCTURA ELECTRÓNICA

**Titulación:** 748 - Máster Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelización Computacional  
762 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2021)

**Centro:** 104 - Facultad de Ciencias

**Curso Académico:** 2021/22

### 1. Detalles de la asignatura

#### 1.1. Materia

MODELIZACIÓN DE ESTRUCTURA ELECTRÓNICA

#### 1.2. Carácter

Optativa

#### 1.3. Nivel

Máster (MECES 3)

#### 1.4. Curso

2

#### 1.5. Semestre

Segundo semestre

#### 1.6. Número de créditos ECTS

6.0

#### 1.7. Idioma

Inglés/Francés.

#### 1.8. Requisitos previos

No hay.

#### 1.9. Recomendaciones

No hay.

<b>Código Seguro de Verificación:</b>		<b>Fecha:</b>	05/07/2021	1/4
<b>Firmado por:</b>	Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas			
<b>Url de Verificación:</b>		<b>Página:</b>	1/4	

## 1.10. Requisitos mínimos de asistencia

La asistencia a clases es obligatoria.

## 1.11. Coordinador/a de la asignatura

Mónica Calatayud (Universidad Sorbona - Paris).

<https://autoservicio.uam.es/paginas-blancas/>

## 1.12. Competencias y resultados del aprendizaje

### 1.12.1. Competencias

#### BÁSICAS Y GENERALES

CG01 - Los estudiantes son 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.

CG02 - 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.

CB6 - 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

CB7 - Que los 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

CB10 - Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida auto dirigido o autónomo.

#### TRANSVERSALES

CT02 - El/la estudiante es organizado en el trabajo demostrando que sabe gestionar el tiempo y los recursos de que dispone.

CT03 - 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.

CT05 - Capacidad de razonamiento y reflexión crítica y autocrítica como vía para mejorar el propio proceso de aprendizaje y la generación y desarrollo de ideas en un contexto profesional o de investigación.

CT09 - Capacidad de obtener, seleccionar, elaborar y procesar información proveniente de fuentes diversas con criterios objetivos, priorizándolas según su calidad y pertinencia

#### ESPECÍFICAS

CE15 - Entiende los principios básicos de las metodologías "ab initio" y Teoría de los Funcionales de la Densidad.

CE16 - El/la estudiante es capaz de discernir entre los diferentes métodos existentes y cómo seleccionar el más adecuado para cada problema.

CE17 - Los estudiantes comprenden y manejan las herramientas matemáticas requeridas para el desarrollo de la Química Teórica en sus aspectos fundamentales y sus aplicaciones.

### 1.12.2. 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.

### 1.12.3. Objetivos de la asignatura

No procede.

## 1.13. Contenidos del programa

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.

## 1.14. Referencias de consulta

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

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	05/07/2021	2/4
Firmado por:	Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas			
Url de Verificación:		Página:	2/4	

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.

## 2. Metodologías docentes y tiempo de trabajo del estudiante

### 2.1. Presencialidad

	#Horas
Porcentaje de actividades presenciales (mínimo 33% del total).	43
Porcentaje de actividades no presenciales.	82

### 2.2. Relación de actividades formativas

Actividades presenciales	Nº horas
Clases teóricas en aula	20
Prácticas con medios informáticos	20
Actividades de evaluación	3

## 3. Sistemas de evaluación y porcentaje en la calificación final

### 3.1. 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.

#### 3.1.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Examen final	20
Ejercicios propuestos	80

### 3.2. Convocatoria extraordinaria

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

#### 3.2.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Ejercicios propuestos.	100
Evaluación continua	0

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	05/07/2021	3/4
Firmado por:	Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas			
Url de Verificación:		Página:	3/4	

#### 4. Cronograma orientativo

La asignatura estará organizada por la Universidad Sorbonna de Paris (Francia).

<b>Código Seguro de Verificación:</b>		<b>Fecha:</b>	05/07/2021	4/4
<b>Firmado por:</b>	Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas			
<b>Url de Verificación:</b>		<b>Página:</b>	4/4	