



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE MADRID

33429 - MODELIZACIÓN MULTIESCALA DE SISTEMAS MOLECULARES COMPLEJOS

Información de la asignatura

Código - Nombre: 33429 - MODELIZACIÓN MULTIESCALA DE SISTEMAS MOLECULARES COMPLEJOS

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 MULTIESCALA DE SISTEMAS MOLECULARES COMPLEJOS.

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.

1.8. Requisitos previos

No hay.

1.9. Recomendaciones

No aplica.

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	05/07/2021	1/3
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	1/3	

1.10. Requisitos mínimos de asistencia

La asistencia a clases es obligatoria.

1.11. Coordinador/a de la asignatura

Mónica Calatayud (Universidad Sorbona).

<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.

CG03 - 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.

CG04 - 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.

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 autodirigido o autónomo.

ESPECÍFICAS

CE13 - 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.

CE19 - El/la 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.

CE22 - Conoce la existencia de técnicas computacionales avanzadas tales como: canalización de instrucciones y datos.

1.12.2. Resultados de aprendizaje

No aplica.

1.12.3. Objetivos de la asignatura

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.

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

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. Weiihheim: Wiley, 2009.

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	05/07/2021	2/3
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	2/3	

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

3.2.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Ejercicios propuestos.	100
Evaluación continua	0

4. Cronograma orientativo

El curso será organizado por la Universidad Sorbona.

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