

## 1. DESCRIPCIÓN DEL TÍTULO

### 1.1. DATOS BÁSICOS

NIVEL	DENOMINACIÓN ESPECÍFICA	CONJUNTO	CONVENIO	CONV. ADJUNTO
Máster	Máster Universitario en Modelización Computacional Atómica y Multiescala en Física, Química y Bioquímica por la Universidad de Barcelona y la Universidad Politécnica de Catalunya	Nacional		Ver Apartado 1: Anexo 1.

#### LISTADO DE ESPECIALIDADES

No existen datos

RAMA	ISCED 1	ISCED 2
Ciencias	Física	Química

NO HABILITA O ESTÁ VINCULADO CON PROFESIÓN REGULADA ALGUNA

#### AGENCIA EVALUADORA

Agència per a la Qualitat del Sistema Universitari de Catalunya

#### UNIVERSIDAD SOLICITANTE

Universidad de Barcelona

#### LISTADO DE UNIVERSIDADES

CÓDIGO	UNIVERSIDAD
004	Universidad de Barcelona
024	Universidad Politécnica de Catalunya

#### LISTADO DE UNIVERSIDADES EXTRANJERAS

CÓDIGO	UNIVERSIDAD
No existen datos	

#### LISTADO DE INSTITUCIONES PARTICIPANTES

No existen datos

### 1.2. DISTRIBUCIÓN DE CRÉDITOS EN EL TÍTULO

CRÉDITOS TOTALES	CRÉDITOS DE COMPLEMENTOS FORMATIVOS	CRÉDITOS EN PRÁCTICAS EXTERNAS
60		0
CRÉDITOS OPTATIVOS	CRÉDITOS OBLIGATORIOS	CRÉDITOS TRABAJO FIN GRADO/ MÁSTER
21	21	18

#### LISTADO DE ESPECIALIDADES

ESPECIALIDAD	CRÉDITOS OPTATIVOS
No existen datos	

### 1.3. Universidad Politécnica de Catalunya

#### 1.3.1. CENTROS EN LOS QUE SE IMPARTE

LISTADO DE CENTROS	
CÓDIGO	CENTRO
08033018	Facultad de Informática

#### 1.3.2. Facultad de Informática

##### 1.3.2.1. Datos asociados al centro

TIPOS DE ENSEÑANZA QUE SE IMPARTEN EN EL CENTRO		
PRESENCIAL	SEMIPRESENCIAL	VIRTUAL
Sí	No	No
PLAZAS DE NUEVO INGRESO OFERTADAS		

PRIMER AÑO IMPLANTACIÓN	SEGUNDO AÑO IMPLANTACIÓN	
0	0	
<b>TIEMPO COMPLETO</b>		
	ECTS MATRÍCULA MÍNIMA	ECTS MATRÍCULA MÁXIMA
PRIMER AÑO	0.0	0.0
RESTO DE AÑOS	0.0	0.0
<b>TIEMPO PARCIAL</b>		
	ECTS MATRÍCULA MÍNIMA	ECTS MATRÍCULA MÁXIMA
PRIMER AÑO	0.0	0.0
RESTO DE AÑOS	0.0	0.0
<b>NORMAS DE PERMANENCIA</b>		
<a href="http://www.ub.edu/acad/noracad/permanencia.pdf">http://www.ub.edu/acad/noracad/permanencia.pdf</a>		
<b>LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE</b>		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
Sí	Sí	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Sí
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
No	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	

### 1.3. Universidad de Barcelona

#### 1.3.1. CENTROS EN LOS QUE SE IMPARTE

LISTADO DE CENTROS	
CÓDIGO	CENTRO
08032968	Facultad de Física
08032971	Facultad de Química

#### 1.3.2. Facultad de Física

##### 1.3.2.1. Datos asociados al centro

TIPOS DE ENSEÑANZA QUE SE IMPARTEN EN EL CENTRO		
PRESENCIAL	SEMIPRESENCIAL	VIRTUAL
Sí	No	No
PLAZAS DE NUEVO INGRESO OFERTADAS		
PRIMER AÑO IMPLANTACIÓN	SEGUNDO AÑO IMPLANTACIÓN	
0	0	
<b>TIEMPO COMPLETO</b>		
	ECTS MATRÍCULA MÍNIMA	ECTS MATRÍCULA MÁXIMA
PRIMER AÑO	0.0	0.0
RESTO DE AÑOS	0.0	0.0
<b>TIEMPO PARCIAL</b>		
	ECTS MATRÍCULA MÍNIMA	ECTS MATRÍCULA MÁXIMA
PRIMER AÑO	0.0	0.0
RESTO DE AÑOS	0.0	0.0
<b>NORMAS DE PERMANENCIA</b>		
<a href="http://www.ub.edu/acad/noracad/permanencia.pdf">http://www.ub.edu/acad/noracad/permanencia.pdf</a>		

LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
Sí	Sí	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Sí
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
No	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	

### 1.3.2. Facultad de Química

#### 1.3.2.1. Datos asociados al centro

TIPOS DE ENSEÑANZA QUE SE IMPARTEN EN EL CENTRO		
PRESENCIAL	SEMPRESENCIAL	VIRTUAL
Sí	No	No
PLAZAS DE NUEVO INGRESO OFERTADAS		
PRIMER AÑO IMPLANTACIÓN	SEGUNDO AÑO IMPLANTACIÓN	
30	40	
TIEMPO COMPLETO		
ECTS MATRÍCULA MÍNIMA		
ECTS MATRÍCULA MÁXIMA		
PRIMER AÑO	49.0	60.0
RESTO DE AÑOS	49.0	60.0
TIEMPO PARCIAL		
ECTS MATRÍCULA MÍNIMA		
ECTS MATRÍCULA MÁXIMA		
PRIMER AÑO	20.0	48.0
RESTO DE AÑOS	20.0	48.0
NORMAS DE PERMANENCIA		
<a href="http://www.ub.edu/acad/noracad/permanencia.pdf">http://www.ub.edu/acad/noracad/permanencia.pdf</a>		
LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
Sí	Sí	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Sí
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
No	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	

## 2. JUSTIFICACIÓN, ADECUACIÓN DE LA PROPUESTA Y PROCEDIMIENTOS

Ver Apartado 2: Anexo 1.

### 3. COMPETENCIAS

3.1 COMPETENCIAS BÁSICAS Y GENERALES
<b>BÁSICAS</b>
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
CB8 - Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios
CB9 - Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades
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.
<b>GENERALES</b>
CG1 - Saber evaluar y seleccionar la teoría científica adecuada y la metodología precisa de sus campos de estudio para formular juicios a partir de información incompleta o limitada incluyendo, cuando sea preciso y pertinente, una reflexión sobre la responsabilidad social o ética ligada a la solución que se proponga en cada caso.
CG2 - Ser capaz de consultar la bibliografía científica, bases de datos y analizar documentos científico-técnicos en inglés.
CG3 - Ser capaz de elaborar informes, presentaciones y publicaciones científicas.
CG4 - Ser capaz de concebir y diseñar un proceso de investigación.
CG5 - Ser capaz de predecir y controlar la evolución de situaciones complejas mediante el desarrollo de nuevas e innovadoras metodologías de trabajo adaptadas al ámbito científico/investigador, tecnológico o profesional concreto, en general multidisciplinar, en el que se desarrolle su actividad.
CG6 - Desarrollar la autonomía suficiente para participar en proyectos de investigación y colaboraciones científicas o tecnológicas dentro su ámbito temático, en contextos interdisciplinares y, en su caso, con una alta componente de transferencia del conocimiento.
<b>3.2 COMPETENCIAS TRANSVERSALES</b>
CT1 - Ser autónomo, dinámico y organizado, con capacidad analítica y de síntesis, con capacidad de análisis crítico y con capacidad de prospectiva.
CT2 - Tener capacidad de autoevaluación y capacidad autocrítica constructiva.
CT3 - Ser capaz de trabajar en equipo y de adaptarse a equipos multidisciplinares e internacionales a diferentes escalas.
CT4 - Tener capacidad de análisis, de síntesis, de adquirir perspectivas globales y de aplicación de los conocimientos a casos prácticos.
CT5 - Tener la capacidad de tomar decisiones y de adaptación a situaciones nuevas.
<b>3.3 COMPETENCIAS ESPECÍFICAS</b>
CE1 - Ser capaz de trabajar en los entornos informáticos que se emplean en los ámbitos de la modelización atómica y multiescala.
CE2 - Comprender y saber utilizar las estructuras algorítmicas básicas en el contexto de lenguajes de programación de alto nivel.
CE3 - Ser capaz de escribir programas en lenguajes de programación de alto nivel y los conceptos básicos de paralelización y optimización que permitan la ejecución paralela de tareas en el contexto de la modelización computacional atómica y multiescala.
CE4 - Ser capaz de escribir scripts para realizar tareas complejas que involucren diferentes programas y comandos del sistema operativo.
CE5 - Comprender los fundamentos matemáticos de los métodos de modelización más habituales y su implementación numérica computacional.
CE6 - Comprender las distintas escalas de tiempo y longitud en la Naturaleza y los formalismos físico-matemáticos que se aplican en cada una de ellas.
CE7 - Comprender las leyes físicas que rigen el comportamiento de sólidos, fluidos y disoluciones en condiciones equilibrio.

CE8 - Comprender las leyes físicas que rigen el comportamiento de macromoléculas y biopolímeros en condiciones de equilibrio.
CE9 - Comprender las leyes físicas que rigen el comportamiento de superficies, interfases, nanopartículas y coloides en condiciones de equilibrio.
CE10 - Comprender las leyes físicas que rigen el comportamiento de sistemas fuera del equilibrio: procesos de relajación y fenómenos de transporte.
CE11 - Comprender las leyes físicas que rigen el comportamiento de sistemas fuera del equilibrio: reactividad química, procesos de reacción-difusión y cambios de fase en sistemas físico-químicos y bioquímicos.
CE12 - Comprender las leyes físicas que rigen el comportamiento de sistemas fuera del equilibrio: procesos metabólicos y transducción de señales en procesos a nivel celular.
CE13 - Dado un material, fenómeno físico o químico o sistema complejo que se quiera modelizar, ser capaz de evaluar y seleccionar las escalas de tiempo y longitud en las que dicho fenómeno tiene lugar.
CE14 - Dado un material, fenómeno físico o químico o sistema complejo que se quiera modelizar, ser capaz de evaluar y seleccionar cuáles son las mejores técnicas de modelización o simulación para describirlo en función de su escala espacio-temporal.
CE15 - Comprender los límites computacionales de aplicación de cada metodología estudiada y ser capaz de discernir para cada caso real de estudio qué aproximación es la más apropiada.
CE16 - Ser capaz de usar distintos paquetes informáticos para estudiar la estructura electrónica de moléculas y sólidos, así como sus propiedades de transporte y reactividad química.
CE17 - Ser capaz de usar distintos paquetes informáticos para estudiar la estructura y propiedades de sólidos, fluidos y disoluciones.
CE18 - Ser capaz de usar distintos paquetes informáticos para estudiar la estructura y propiedades de macromoléculas y biopolímeros.
CE19 - Ser capaz de usar distintos paquetes informáticos para estudiar la estructura y propiedades de superficies, nanopartículas, interfases y coloides.
CE20 - Ser capaz de usar los distintos paquetes informáticos disponibles que permiten aplicar distintas técnicas de modelización molecular estándar.
CE21 - Comprender los fundamentos de las técnicas de simulación basadas en campos de fuerza.
CE22 - Comprender los fundamentos de las técnicas de simulación multiescala basadas en modelos coarse-graining.

## 4. ACCESO Y ADMISIÓN DE ESTUDIANTES

### 4.1 SISTEMAS DE INFORMACIÓN PREVIO

Ver Apartado 4: Anexo I.

### 4.2 REQUISITOS DE ACCESO Y CRITERIOS DE ADMISIÓN

#### Titulaciones oficiales de acceso

El máster en Modelización Computacional Atomística y Multiescala en Física, Química y Bioquímica es de acceso directo para alumnos que hayan cursado los grados oficiales de 240 ECTS en Química, Física, Bioquímica, Ingeniería Química, Ingeniería de Materiales e Ingeniería Física o equivalentes. También podrán acceder estudiantes de otras titulaciones nacionales o extranjeras diferentes a las mencionadas que cumplan con los conocimientos adecuados para el aprovechamiento de las enseñanzas del máster, debiendo cursar, en cada caso, los complementos formativos que la Comisión Coordinadora considere oportunos.

#### Órgano de admisión

La Cláusula Segunda del convenio establece lo siguiente:

#### Órganos de gobierno del máster y mecanismos para asegurar la coordinación interuniversitaria.

Para garantizar la coordinación de la oferta formativa y de asegurar la calidad del máster se crearán los siguientes órganos de gobierno y los mecanismos de coordinación del máster universitario.

A. Coordinador/a general del máster, que será el responsable interno del máster designado por universidad coordinadora.

B. Responsable/a interno/a del máster para cada una de las universidades, que se designa de acuerdo con los mecanismos establecidos por cada universidad.

C. Comisión de coordinación del máster, integrada por el mismo número de representantes de cada universidad, entre los cuales estarán el coordinador/a general y los coordinadores internos de cada universidad. Es el órgano responsable del desarrollo del programa.

(...)

4. Las funciones de los diferentes órganos de gobierno del máster son los siguientes:

(...)

C. Comisión de coordinación del máster:

- a) Asume el establecimiento de criterios de admisión y selección de estudiantes, el proceso de selección y la evaluación de aprendizajes previos, o, alternativamente, acuerda la creación de una subcomisión de acceso que asuma estas funciones, de acuerdo con lo que esté establecido en la memoria de verificación del máster.
- b) Es depositaria de las candidaturas para la admisión y la selección de estudiantes y responsable de los sistemas de reclamación.
- c) En el proceso de admisión, analiza las propuestas de los responsables internos de cada universidad y decide el conjunto de alumnado admitido, a través de la subcomisión de acceso, si es el caso.
- d) Desarrolla un protocolo y un plan para distribuir y publicitar el máster.
- e) Informa sobre las condiciones del convenio de colaboración.
- f) (sólo si el máster tiene optatividad) Fija la oferta anual de asignaturas del máster a partir de las propuestas de los responsables internos de cada universidad.
- g) Es responsable del funcionamiento general del programa y de la asignación de prácticas, así como de estimular y coordinar la movilidad y de analizar los resultados que garantizan la calidad del máster.
- h) Elabora el plan de usos e infraestructuras y servicios compartidos que potencie el rendimiento del estudiante, de aularios, de espacios docentes, etc.
- i) A través del análisis de los puntos débiles y de las potencialidades del máster, plantea propuestas de mejora y establece los mecanismos para hacer un seguimiento de la implantación.
- j) Establece la periodicidad de sus reuniones y el sistema de toma de decisiones para llegar a los acuerdos correspondientes, y crea las subcomisiones o comisiones específicas que considere oportunas.
- k) Vela por el correcto desarrollo de las obligaciones, los derechos y los compromisos derivados del contenido del convenio, y resuelve las dudas que puedan plantearse en la interpretación y la ejecución de los acuerdos.
- l) Decide sobre los aspectos docentes que no estén regulados por las disposiciones legales o por las normativas de las universidades.
- m) Promueve todas las actividades conjuntas que potencien el carácter interuniversitario del máster.

#### Requisitos de admisión y criterios de selección

El alumno presentará en la secretaría de post-grado de la Facultad de Química la documentación que se requiera, en función de si proviene o no del EEES. Los procesos de admisión y selección correrán a cargo de la correspondiente Comisión de Coordinación del máster, formada por los representantes designados por los órganos de gobierno académico#docente y por una representación de los departamentos implicados en la docencia del máster.

#### Requisitos de admisión:

- 1) Podrán acceder al máster en Modelización Computacional Atómica y Multiescala en Física, Química y Bioquímica los alumnos que hayan cursado los grados oficiales de 240 ECTS en Química, Física, Bioquímica, Ingeniería Química, Ingeniería de Materiales e Ingeniería Física o equivalentes.
- 2) Podrán ser admitidos los estudiantes provenientes de otras titulaciones nacionales o extranjeras diferentes a las mencionadas en el punto anterior que cumplan con los conocimientos adecuados para el aprovechamiento de las enseñanzas del máster. Dicho cumplimiento se evaluará en base al curriculum académico del estudiante y de la adecuación de los contenidos de las asignaturas cursadas (principalmente en matemáticas, física y química). Los estudiantes que no hayan cursado una titulación de acceso directo deberán cursar los complementos de formación que la Comisión de Coordinación del máster considere necesarios en cada caso, hasta a un máximo de 30 ECTS, para garantizar el aprovechamiento de los estudios.

En cualquier caso, es obligatorio tener un nivel de inglés equivalente, como mínimo, al B1 del Marco europeo común de referencia.

#### Criterios de selección:

La selección de los estudiantes se efectuará por la correspondiente Comisión de Coordinación del máster en base a su curriculum#vitae con la posibilidad de entrevista personal. Se valorará como méritos preferentes de los currículos los siguientes aspectos:

- a) el expediente académico relacionadas con las materias básicas (matemáticas, física y química) e informática (75%);
- b) el conocimiento de idiomas europeos mediante certificación oficial (diferentes al B1 de inglés) (15%);
- c) el interés del estudiante en cursar el máster mediante, o bien una entrevista con la Comisión Coordinadora, o bien una carta de presentación donde se indique la motivación de la elección del presente máster (10%).

Los estudiantes que no hayan cursado una titulación de acceso directo deberán cursar los complementos de formación que la Comisión de Coordinación del máster considere necesarios, hasta a un máximo de 30 ECTS, para garantizar el aprovechamiento de los estudios.

#### 4.3 APOYO A ESTUDIANTES

La UB, desde cada uno de sus centros, realiza actividades y programas específicos de información y de atención al estudiante matriculado en la universidad, en colaboración con el SAE (Servicio de atención al estudiante).

Estas actividades y programas están enmarcados en el plan de acción tutorial de la Universidad de Barcelona (PAT). Se trata de un plan institucional de cada titulación, donde se especifican los objetivos y la organización de la acción tutorial.

Cada máster elabora su Plan de Acción Tutorial (PAT) en el que tiene que incluir como mínimo:

- a) Análisis del contexto y de las necesidades del máster
- b) Objetivos del PAT.
- c) Actividades o acciones que se desarrollarán, indicando un calendario orientativo y las personas responsables.
- d) Organización del PAT
- e) Seguimiento y evaluación del PAT

Las acciones que incluye el plan de acción tutorial son:

##### Acciones en la fase inicial de los estudios del máster:

- a) Actividades de presentación del máster.
- b) Colaboración en actividades de acogida para los estudiantes de programas de movilidad matriculados en la UB.
- c) Colaboración con los coordinadores de programas de movilidad.

##### Acciones durante el desarrollo de los estudios de máster:

- a) Atención personalizada al estudiante para orientarlo, y ayudarlo a incrementar el rendimiento académico, especialmente respecto de su itinerario curricular y de la ampliación de su horizonte formativo, en un marco de confidencialidad y de respeto a su autonomía.
- b) Información de interés para el estudiante: estancias formativas fuera de la UB (programas Erasmus, o equivalentes), becas, otras ofertas de máster.

##### Acciones en la fase final de los estudios:

- a) Acciones de formación y de orientación para la inserción profesional y para la continuidad en otros estudios.
- b) Información sobre recursos del SAE relacionados con la inserción laboral.
- c) Atención personalizada al estudiante para orientarlo, especialmente respecto a su inserción profesional y a la continuidad de los estudios.

Finalmente, cabe mencionar que la Facultad de Química ha aprobado recientemente un procedimiento de orientación al estudiante PEQ150 donde se especifican las obligaciones del centro en lo referente a la acogida de estudiantes de Grado y Máster. Las actividades de orientación previstas para los estudiantes de máster, calendarios correspondientes y órganos y servicios responsables se detallan en la web de la Facultad (<http://www.ub.edu/quimica>) que se encuentra disponible en el documento:

<http://www.ub.edu/quimica/qualitat/static/SAIQU/Procediments/PEQ050V2.pdf>

En este documento se incluyen diferentes acciones dirigidas a dar apoyo al alumnado con características o perfiles específicos y acciones dirigidas específicamente a informar y dar apoyo a estudiantes extranjeros.

Otras consideraciones a tener en cuenta y que se incluyen en el documento del plan de acción tutorial hacen referencia a las funciones de los coordinadores del PAT, al alcance de las acciones tutoriales, a las figuras de los tutores para la atención personalizada a los estudiantes, y al seguimiento y evaluación del plan.

La UPC dispone de sistemas análogos a los descritos que se utilizarán para ofrecer una ayuda a los estudiantes que accedan a través de esta universidad. Sin embargo, la Comisión de Coordinación del Máster velará por coordinar los sistemas de apoyo y orientación de los estudiantes matriculados máster que se presenta estableciendo un responsable de contacto que supervise y coordine estos aspectos con la universidad coordinadora.

#### 4.4 SISTEMA DE TRANSFERENCIA Y RECONOCIMIENTO DE CRÉDITOS

##### Reconocimiento de Créditos Cursados en Enseñanzas Superiores Oficiales no Universitarias

MÍNIMO

MÁXIMO

0	0
<b>Reconocimiento de Créditos Cursados en Títulos Propios</b>	
<b>MÍNIMO</b>	<b>MÁXIMO</b>
0	9
<b>Adjuntar Título Propio</b>	

Ver Apartado 4: Anexo 2.

<b>Reconocimiento de Créditos Cursados por Acreditación de Experiencia Laboral y Profesional</b>	
<b>MÍNIMO</b>	<b>MÁXIMO</b>
0	9

**Normas para el reconocimiento y para la transferencia de créditos en las enseñanzas oficiales de máster universitario de la Universidad de Barcelona (Aprobadas por el Consejo de Gobierno de 7 de junio de 2011 y modificadas por el Consejo de Gobierno de 29 de mayo de 2013)**

El Real Decreto 1393/2007, de 29 de octubre, por el que se establece la ordenación de las enseñanzas universitarias oficiales de grado, máster y doctorado impartidas por las universidades españolas en todo el territorio estatal (modificado por el RD 861/2010, de 2 de julio), establece como uno de los objetivos fundamentales de la organización de las enseñanzas el fomento de la movilidad de los estudiantes, tanto dentro de Europa como en otras partes del mundo y, sobre todo, la movilidad entre las distintas universidades españolas y dentro de una misma universidad. Resulta, por tanto, imprescindible disponer de un sistema de reconocimiento, de transferencia y de acumulación de créditos, en el que los créditos cursados previamente sean reconocidos e incorporados al expediente del estudiante.

En este sentido, estas normas pretenden regular el procedimiento y los criterios que se deberán aplicar en la Universidad de Barcelona, respetando la legislación vigente.

El reconocimiento de créditos es la aceptación por parte de la Universidad de Barcelona de la formación o experiencia profesional que figura a continuación, y que se computa en el expediente de otras enseñanzas que el estudiante esté cursando al efecto de la obtención de un título oficial.

En ningún caso se reconocerán los créditos correspondientes al trabajo final de máster.

**Formación o experiencia profesional objeto de reconocimiento**

- a ) Los créditos obtenidos en enseñanzas oficiales cursadas con anterioridad, en la Universidad de Barcelona o en cualquier otra universidad, computan en las nuevas enseñanzas oficiales, a efectos de obtener un título oficial.
- b ) Los créditos cursados en enseñanzas superiores conducentes a otros títulos amparados por el artículo 34.1 de la Ley 6 / 2001 de Universidades.
- c ) La experiencia laboral y profesional, siempre que esté relacionada con las competencias de la titulación que está cursando el estudiante.

El límite de créditos que se podrán reconocer, basándose en otros títulos y en la experiencia profesional, no podrá ser superior, en conjunto, al 15 % de los créditos del plan de estudios que el estudiante está cursando.

Únicamente se podrá reconocer un porcentaje superior al 15 %, hasta la totalidad de créditos del plan de estudios, cuando el título propio haya sido extinguido y sustituido por el título oficial, y así conste en la memoria del título oficial verificada en las condiciones establecidas en los artículos 6.4 y 6.5 del Real Decreto 861/2010.

En el caso de reconocimiento de créditos por acreditación de experiencia laboral y profesional, la Comisión de Coordinación del máster considerará la experiencia en programación y gestión de sistemas informáticos (nivel avanzado) o la formación en I+D en el ámbito de la modelización computacional para evaluar la posible convalidación de créditos de asignaturas de informática o de uso de paquetes informáticos en modelización avanzada (materiales, fármacos, etc.) analizando las contribuciones documentadas que alegue el solicitante sobre los proyectos en los que haya participado.

**4.6 COMPLEMENTOS FORMATIVOS**

Los estudiantes con titulación de acceso diferente a las titulaciones oficiales que dan acceso directo este máster o los estudiantes procedentes de otros países con grados de 180 ECTS deberán cursar complementos formativos. La Comisión de Coordinación del máster analizará el currículum académico de cada candidato para establecer los complementos de formación que considere necesarios para para garantizar el aprovechamiento de los estudios.

Los complementos de formación no superarán los 30 ECTS y consistirán en asignaturas obligatorias de los grados de Química y de Física:

- Matemáticas I (Química, 6 ECTS)
- Matemáticas II (Química, 6 ECTS)
- Física I (Química, 6 ECTS)
- Física II (Química, 6 ECTS)
- Química Física I (Química, 6 ECTS)
- Química Física II (Química, 6 ECTS)
- Química Física III (Química, 6 ECTS)
- Física Cuántica (Física, 6 ECTS)
- Física Estadística (Física, 6 ECTS)
- Mecánica Teórica (Física, 6 ECTS)
- Física de los Medios Continuos (Física, 6 ECTS)
- Física del Estado Sólido (Física, 6 ECTS)

Los complementos formativos se deberán cursar antes del comienzo del máster. La Comisión Coordinadora del Máster podrá autorizar, si lo considera oportuno, que un estudiante pueda cursar simultáneamente alguna de las asignaturas del máster, siempre que los conocimientos previos acreditados por éste garanticen el correcto aprovechamiento de la docencia recibida. En cualquier caso se respetarán los límites establecidos por la Normativa de Permanencia de la UB respecto al número de créditos que pueden matricularse en cada curso académico.

## 5. PLANIFICACIÓN DE LAS ENSEÑANZAS

<b>5.1 DESCRIPCIÓN DEL PLAN DE ESTUDIOS</b>		
Ver Apartado 5: Anexo 1.		
<b>5.2 ACTIVIDADES FORMATIVAS</b>		
Teoría (presencialidad: 100%)		
Teoricopráctica (presencialidad: 100%)		
Prácticas de problemas (presencialidad: 100%)		
Prácticas de ordenador (presencialidad: 100%)		
Prácticas orales comunicativas (presencialidad: 100%)		
Trabajo tutelado (presencialidad: 20%)		
Trabajo autónomo (presencialidad: 0%)		
<b>5.3 METODOLOGÍAS DOCENTES</b>		
Clases expositivas: En las clases expositivas uno o más estudiantes presentan de forma oral un tema o trabajo, preparado previamente, delante del resto de compañeros del grupo. En ocasiones puede resultar interesante una presentación escrita previa.		
Conferencias: Exposición pública sobre un tema de carácter científico, técnico o cultural llevada a cabo por una persona experta.		
Trabajo en grupo: Actividad de aprendizaje que se tiene que hacer mediante la colaboración entre los miembros de un grupo.		
Trabajo escrito: Actividad consistente en la presentación de un documento escrito.		
Actividades de aplicación: Con las actividades de aplicación se consigue contextualizar el aprendizaje teórico a través de su aplicación a un hecho, suceso, situación, dato o fenómeno concreto, seleccionado para que facilite el aprendizaje.		
Aprendizaje basado en problemas: Se utiliza el aprendizaje basado en problemas como método de promover el aprendizaje a partir de problemas seleccionados de la vida real. Es necesario que cada alumno identifique y analice el problema, formule interrogantes para convertirlos en objetivos de aprendizaje, busque información para darle respuesta e interaccione, socializando así este conocimiento. Este tipo de metodología permite adquirir conocimientos conceptuales y desarrollar habilidades y actitudes de manera que se convierte en una estrategia especialmente interesante para alcanzar competencias.		
Resolución de problemas: En la actividad de resolución de problemas, el profesorado presenta una cuestión compleja que el alumnado debe resolver, ya sea trabajando individualmente, o en equipo.		
Búsqueda de información: La búsqueda de información, organizada como búsqueda de información de manera activa por parte del alumnado, permite la adquisición de conocimientos de forma directa pero también la adquisición de habilidades y actitudes relacionadas con la obtención de información.		
Prácticas: Permiten aplicar y configurar, a nivel práctico, la teoría de un ámbito de conocimiento en un contexto concreto.		
Clases magistrales: En las clases magistrales se exponen los contenidos de la asignatura de forma oral por parte de un profesor o profesora sin la participación activa del alumnado.		
Ejercicios prácticos: la actividad basada en los ejercicios prácticos consiste en la formulación, análisis, resolución o debate de un problema relacionado con la temática de la asignatura. Dicha actividad tiene como objetivo el aprendizaje mediante la práctica de conocimientos o habilidades programados.		
<b>5.4 SISTEMAS DE EVALUACIÓN</b>		
Pruebas escritas: examen, cuestionarios (de elección entre diferentes respuestas, de distinción verdadero/falso, de emparejamiento, ...), pruebas objetivas (respuestas simples, completar la frase, ...), pruebas de ensayo, mapas conceptuales y similares, actividades de aplicación, estudio de casos, resolución de problemas, ...		
Pruebas orales: entrevistas o exámenes, puestas en común, exposiciones, ...		
Trabajos realizados por el estudiante: memorias, dossieres, proyectos, carpeta de aprendizaje, ...		
<b>5.5 SIN NIVEL 1</b>		
<b>NIVEL 2: ELEMENTOS DE MATEMÁTICA APLICADA E INFORMÁTICA</b>		
<b>5.5.1.1 Datos Básicos del Nivel 2</b>		
<b>CARÁCTER</b>	Obligatoria	
<b>ECTS NIVEL 2</b>	9	
<b>DESPLIEGUE TEMPORAL: Semestral</b>		
<b>ECTS Semestral 1</b>	<b>ECTS Semestral 2</b>	<b>ECTS Semestral 3</b>

9		
<b>ECTS Semestral 4</b>	<b>ECTS Semestral 5</b>	<b>ECTS Semestral 6</b>
<b>ECTS Semestral 7</b>	<b>ECTS Semestral 8</b>	<b>ECTS Semestral 9</b>
<b>ECTS Semestral 10</b>	<b>ECTS Semestral 11</b>	<b>ECTS Semestral 12</b>
<b>LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE</b>		
<b>CASTELLANO</b>	<b>CATALÁN</b>	<b>EUSKERA</b>
Sí	Sí	No
<b>GALLEGO</b>	<b>VALENCIANO</b>	<b>INGLÉS</b>
No	No	Sí
<b>FRANCÉS</b>	<b>ALEMÁN</b>	<b>PORTUGUÉS</b>
No	No	No
<b>ITALIANO</b>	<b>OTRAS</b>	
No	No	
<b>NIVEL 3: HERRAMIENTAS INFORMÁTICAS</b>		
<b>5.5.1.1.1 Datos Básicos del Nivel 3</b>		
<b>CARÁCTER</b>	<b>ECTS ASIGNATURA</b>	<b>DESPLIEGUE TEMPORAL</b>
Obligatoria	3	Semestral
<b>DESPLIEGUE TEMPORAL</b>		
<b>ECTS Semestral 1</b>	<b>ECTS Semestral 2</b>	<b>ECTS Semestral 3</b>
3	0	
<b>ECTS Semestral 4</b>	<b>ECTS Semestral 5</b>	<b>ECTS Semestral 6</b>
<b>ECTS Semestral 7</b>	<b>ECTS Semestral 8</b>	<b>ECTS Semestral 9</b>
<b>ECTS Semestral 10</b>	<b>ECTS Semestral 11</b>	<b>ECTS Semestral 12</b>
<b>LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE</b>		
<b>CASTELLANO</b>	<b>CATALÁN</b>	<b>EUSKERA</b>
Sí	Sí	No
<b>GALLEGO</b>	<b>VALENCIANO</b>	<b>INGLÉS</b>
No	No	Sí
<b>FRANCÉS</b>	<b>ALEMÁN</b>	<b>PORTUGUÉS</b>
No	No	No
<b>ITALIANO</b>	<b>OTRAS</b>	
No	No	
<b>NIVEL 3: INTRODUCCIÓN A LA COMPUTACIÓN CIENTÍFICA</b>		
<b>5.5.1.1.1 Datos Básicos del Nivel 3</b>		
<b>CARÁCTER</b>	<b>ECTS ASIGNATURA</b>	<b>DESPLIEGUE TEMPORAL</b>
Obligatoria	6	Semestral
<b>DESPLIEGUE TEMPORAL</b>		
<b>ECTS Semestral 1</b>	<b>ECTS Semestral 2</b>	<b>ECTS Semestral 3</b>
6	0	
<b>ECTS Semestral 4</b>	<b>ECTS Semestral 5</b>	<b>ECTS Semestral 6</b>
<b>ECTS Semestral 7</b>	<b>ECTS Semestral 8</b>	<b>ECTS Semestral 9</b>
<b>ECTS Semestral 10</b>	<b>ECTS Semestral 11</b>	<b>ECTS Semestral 12</b>

<b>LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE</b>		
<b>CASTELLANO</b>	<b>CATALÁN</b>	<b>EUSKERA</b>
Sí	Sí	No
<b>GALLEGO</b>	<b>VALENCIANO</b>	<b>INGLÉS</b>
No	No	Sí
<b>FRANCÉS</b>	<b>ALEMÁN</b>	<b>PORTUGUÉS</b>
No	No	No
<b>ITALIANO</b>	<b>OTRAS</b>	
No	No	
<b>5.5.1.2 RESULTADOS DE APRENDIZAJE</b>		
<p><b>INTRODUCCIÓN A LA COMPUTACIÓN CIENTÍFICA</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Saber interpolar y aproximar funciones y datos numéricos.</li> <li>• Saber realizar cálculos numéricos de integrales y derivadas de funciones.</li> <li>• Resolver numéricamente ecuaciones y sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias.</li> <li>• Resolver, sabiendo elegir el método más adecuado, sistemas lineales de ecuaciones.</li> <li>• Resolver ecuaciones y sistemas de ecuaciones no lineales.</li> <li>• Calcular, sabiendo elegir el método más adecuado, los valores propios de una matriz cuadrada.</li> <li>• Modelizar y resolver matemáticamente problemas científico#técnicos básicos.</li> <li>• Saber tratar numéricamente tipos comunes de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales.</li> <li>• Saber aplicar los métodos de optimización comunes.</li> <li>• Adquirir el suficiente manejo con el ordenador como para realizar las competencias anteriores de forma rápida y eficaz con su ayuda y la del software matemático adecuado.</li> </ul> <p><b>HERRAMIENTAS INFORMÁTICAS</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Adquirir los conocimientos básicos del sistema operativo LINUX para su utilización efectiva a la computación científica.</li> <li>• Identificar los elementos relevantes de uso y gestión de un computador con este sistema operativo.</li> <li>• Adquirir nociones de programación estructurada y del lenguaje FORTRAN90 para desarrollar programas de cálculo científico usando.</li> <li>• Conocer las opciones de optimización de los lenguajes compilados y su utilidad para depurar errores.</li> <li>• Adquirir el dominio suficiente de paquetes gráficos avanzados para el tratamiento y representación de datos, paquetes matemáticos para resolver problemas científicos y aplicar herramientas de representación de estructuras y formas 3D.</li> </ul>		
<b>5.5.1.3 CONTENIDOS</b>		
<p><b>INTRODUCCIÓN A LA COMPUTACIÓN CIENTÍFICA</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Datos: Variables. Tablas y listas. Funciones. Matrices y vectores.</li> <li>• Funciones: Discretización y precisión. Ceros. Series, productos y fracciones continuas.</li> <li>• Métodos de aproximación de funciones por regresión lineal, polinomial y multilínea. Interpolación y aproximación por series.</li> <li>• Elementos de álgebra lineal aplicada: espacios vectoriales y operadores. Ortonormalización. Operaciones con matrices. Sistemas de ecuaciones lineales. Inversión de matrices. Valores y vectores propios. Diagonalización. Transformaciones lineales.</li> <li>• Integración y diferenciación numérica: Derivación e integración de funciones de una variable. Funciones multivariable: Derivadas parciales. Integrales de línea, superficie y volumen. Transformadas integrales.</li> <li>• Ecuaciones diferenciales ordinarias (EDO): Aspectos formales. Métodos numéricos de resolución. Métodos de Fourier. Ecuaciones diferenciales no lineales.</li> <li>• Ecuaciones en derivadas parciales (EDP). Aspectos formales: definiciones y condiciones de contorno. Métodos numéricos de resolución.</li> <li>• Métodos de optimización. Montecarlo.</li> </ul> <p><b>HERRAMIENTAS INFORMÁTICAS</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Sistema operativo LINUX: Comandos básicos del sistema, editor VI, scripts y Bash Shell.</li> <li>• Introducción a la programación en lenguajes de alto nivel. Aspectos de precisión y errores en computación.</li> <li>• Estructuras algorítmicas básicas.</li> <li>• Introducción a los lenguajes de programación de alto nivel. Lenguaje FORTRAN90. Librerías.</li> <li>• Conceptos básicos de optimización, paralelización y vectorización.</li> <li>• Uso de paquetes informáticos de interés general para aplicaciones científicas: Python, Maxima, Gnuplot/Origin/VMD.</li> </ul>		
<b>5.5.1.4 OBSERVACIONES</b>		
<b>5.5.1.5 COMPETENCIAS</b>		
<b>5.5.1.5.1 BÁSICAS Y GENERALES</b>		
CG2 - Ser capaz de consultar la bibliografía científica, bases de datos y analizar documentos científico-técnicos en inglés.		
CG5 - Ser capaz de predecir y controlar la evolución de situaciones complejas mediante el desarrollo de nuevas e innovadoras metodologías de trabajo adaptadas al ámbito científico/investigador, tecnológico o profesional concreto, en general multidisciplinar, en el que se desarrolle su actividad.		

CG6 - Desarrollar la autonomía suficiente para participar en proyectos de investigación y colaboraciones científicas o tecnológicas dentro su ámbito temático, en contextos interdisciplinarios y, en su caso, con una alta componente de transferencia del conocimiento.		
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		
CB8 - Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios		
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.		
<b>5.5.1.5.2 TRANSVERSALES</b>		
CT1 - Ser autónomo, dinámico y organizado, con capacidad analítica y de síntesis, con capacidad de análisis crítico y con capacidad de prospectiva.		
CT4 - Tener capacidad de análisis, de síntesis, de adquirir perspectivas globales y de aplicación de los conocimientos a casos prácticos.		
<b>5.5.1.5.3 ESPECÍFICAS</b>		
CE1 - Ser capaz de trabajar en los entornos informáticos que se emplean en el los ámbitos de la modelización atomística y multiescala.		
CE2 - Comprender y saber utilizar las estructuras algorítmicas básicas en el contexto de lenguajes de programación de alto nivel.		
CE3 - Ser capaz de escribir programas en lenguajes de programación de alto nivel y los conceptos básicos de paralelización y optimización que permitan la ejecución paralela de tareas en el contexto de la modelización computacional atomística y multiescala.		
CE4 - Ser capaz de escribir scripts para realizar tareas complejas que involucren diferentes programas y comandos del sistema operativo.		
CE5 - Comprender los fundamentos matemáticos de los métodos de modelización más habituales y su implementación numérica computacional.		
<b>5.5.1.6 ACTIVIDADES FORMATIVAS</b>		
<b>ACTIVIDAD FORMATIVA</b>	<b>HORAS</b>	<b>PRESENCIALIDAD</b>
Teoricopráctica (presencialidad: 100%)	60	100
Prácticas de ordenador (presencialidad: 100%)	40	100
Trabajo tutelado (presencialidad: 20%)	45	20
Trabajo autónomo (presencialidad: 0%)	95	0
<b>5.5.1.7 METODOLOGÍAS DOCENTES</b>		
Trabajo escrito: Actividad consistente en la presentación de un documento escrito.		
Actividades de aplicación: Con las actividades de aplicación se consigue contextualizar el aprendizaje teórico a través de su aplicación a un hecho, suceso, situación, dato o fenómeno concreto, seleccionado para que facilite el aprendizaje.		
Resolución de problemas: En la actividad de resolución de problemas, el profesorado presenta una cuestión compleja que el alumnado debe resolver, ya sea trabajando individualmente, o en equipo.		
Prácticas: Permiten aplicar y configurar, a nivel práctico, la teoría de un ámbito de conocimiento en un contexto concreto.		
Clases magistrales: En las clases magistrales se exponen los contenidos de la asignatura de forma oral por parte de un profesor o profesora sin la participación activa del alumnado.		
<b>5.5.1.8 SISTEMAS DE EVALUACIÓN</b>		
<b>SISTEMA DE EVALUACIÓN</b>	<b>PONDERACIÓN MÍNIMA</b>	<b>PONDERACIÓN MÁXIMA</b>
Pruebas escritas: examen, cuestionarios (de elección entre diferentes respuestas, de distinción verdadero/falso, de emparejamiento, ...), pruebas objetivas (respuestas simples, completar la frase, ...), pruebas de ensayo, mapas conceptuales y similares, actividades de	0.0	30.0

aplicación, estudio de casos, resolución de problemas, ...		
Pruebas orales: entrevistas o exámenes, puestas en común, exposiciones, ...	0.0	30.0
Trabajos realizados por el estudiante: memorias, dosieres, proyectos, carpeta de aprendizaje, ...	40.0	70.0
<b>NIVEL 2: MODELIZACIÓN EN LA MULTIESCALA</b>		
<b>5.5.1.1 Datos Básicos del Nivel 2</b>		
<b>CARÁCTER</b>	Obligatoria	
<b>ECTS NIVEL 2</b>	6	
<b>DESPLIEGUE TEMPORAL: Semestral</b>		
<b>ECTS Semestral 1</b>	<b>ECTS Semestral 2</b>	<b>ECTS Semestral 3</b>
6		
<b>ECTS Semestral 4</b>	<b>ECTS Semestral 5</b>	<b>ECTS Semestral 6</b>
<b>ECTS Semestral 7</b>	<b>ECTS Semestral 8</b>	<b>ECTS Semestral 9</b>
<b>ECTS Semestral 10</b>	<b>ECTS Semestral 11</b>	<b>ECTS Semestral 12</b>
<b>LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE</b>		
<b>CASTELLANO</b>	<b>CATALÁN</b>	<b>EUSKERA</b>
Sí	Sí	No
<b>GALLEGO</b>	<b>VALENCIANO</b>	<b>INGLÉS</b>
No	No	Sí
<b>FRANCÉS</b>	<b>ALEMÁN</b>	<b>PORTUGUÉS</b>
No	No	No
<b>ITALIANO</b>	<b>OTRAS</b>	
No	No	
<b>NIVEL 3: MODELIZACIÓN EN LA MULTIESCALA</b>		
<b>5.5.1.1.1 Datos Básicos del Nivel 3</b>		
<b>CARÁCTER</b>	<b>ECTS ASIGNATURA</b>	<b>DESPLIEGUE TEMPORAL</b>
Obligatoria	6	Semestral
<b>DESPLIEGUE TEMPORAL</b>		
<b>ECTS Semestral 1</b>	<b>ECTS Semestral 2</b>	<b>ECTS Semestral 3</b>
6	0	
<b>ECTS Semestral 4</b>	<b>ECTS Semestral 5</b>	<b>ECTS Semestral 6</b>
<b>ECTS Semestral 7</b>	<b>ECTS Semestral 8</b>	<b>ECTS Semestral 9</b>
<b>ECTS Semestral 10</b>	<b>ECTS Semestral 11</b>	<b>ECTS Semestral 12</b>
<b>LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE</b>		
<b>CASTELLANO</b>	<b>CATALÁN</b>	<b>EUSKERA</b>
Sí	Sí	No
<b>GALLEGO</b>	<b>VALENCIANO</b>	<b>INGLÉS</b>
No	No	Sí
<b>FRANCÉS</b>	<b>ALEMÁN</b>	<b>PORTUGUÉS</b>
No	No	No
<b>ITALIANO</b>	<b>OTRAS</b>	

No	No
<b>5.5.1.2 RESULTADOS DE APRENDIZAJE</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Conocer las diferentes escalas de longitud y tiempo en que suceden los procesos físicos, químicos y bioquímicos objeto del presente máster, desde los fenómenos a escala atómico-molecular hasta los que ocurren a nivel macroscópico.</li> <li>• Conocer las diferentes teorías físico-matemáticas de descripción de los fenómenos físicos, químicos y bioquímicos, en las diferentes escalas de longitud y tiempo consideradas.</li> <li>• Saber relacionar las diferentes magnitudes fisicoquímicas, propias de cada escala, con las de las otras escalas de descripción. En particular, las relaciones estructura-propiedad, típicas de las relaciones entre la escala macroscópica y la microscópica.</li> <li>• Saber buscar y organizar la información relacionada con la materia en las fuentes primarias y secundarias.</li> <li>• Familiarización con distintos casos particulares de descripción a diferentes escalas de longitud y tiempo.</li> <li>• Saber resolver problemas prácticos de la aplicación de las teorías físico-matemáticas estudiadas, así como de las magnitudes y unidades empleadas en cada caso.</li> </ul>	
<b>5.5.1.3 CONTENIDOS</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Introducción al método científico y a las escalas de longitud y tiempo presentes en la Naturaleza.</li> <li>• Sistemas en equilibrio. El mundo microscópico: estructura atómico-molecular. El mundo macroscópico: Termodinámica de equilibrio. El mundo mesoscópico: mecánica estadística del equilibrio.</li> <li>• Ejemplos de estructura y propiedades macroscópicas: fluidos, disoluciones, interfases, nanopartículas, coloides, macromoléculas, biopolímeros y materiales.</li> <li>• Fenómenos de transporte: procesos de reacción-difusión, cambios de fases en sistemas físico-químicos y bioquímicos, procesos metabólicos y de transducción de señales.</li> <li>• Reactividad química.</li> <li>• Sistemas complejos: modelización de sistemas biológicos y de redes complejas.</li> </ul>	
<b>5.5.1.4 OBSERVACIONES</b>	
<b>5.5.1.5 COMPETENCIAS</b>	
<b>5.5.1.5.1 BÁSICAS Y GENERALES</b>	
CG1 - Saber evaluar y seleccionar la teoría científica adecuada y la metodología precisa de sus campos de estudio para formular juicios a partir de información incompleta o limitada incluyendo, cuando sea preciso y pertinente, una reflexión sobre la responsabilidad social o ética ligada a la solución que se proponga en cada caso.	
CG2 - Ser capaz de consultar la bibliografía científica, bases de datos y analizar documentos científico-técnicos en inglés.	
CG3 - Ser capaz de elaborar informes, presentaciones y publicaciones científicas.	
CG5 - Ser capaz de predecir y controlar la evolución de situaciones complejas mediante el desarrollo de nuevas e innovadoras metodologías de trabajo adaptadas al ámbito científico/investigador, tecnológico o profesional concreto, en general multidisciplinar, en el que se desarrolle su actividad.	
CG6 - Desarrollar la autonomía suficiente para participar en proyectos de investigación y colaboraciones científicas o tecnológicas dentro su ámbito temático, en contextos interdisciplinares y, en su caso, con una alta componente de transferencia del conocimiento.	
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	
CB8 - Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios	
CB9 - Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades	
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.	
<b>5.5.1.5.2 TRANSVERSALES</b>	
CT1 - Ser autónomo, dinámico y organizado, con capacidad analítica y de síntesis, con capacidad de análisis crítico y con capacidad de prospectiva.	
CT2 - Tener capacidad de autoevaluación y capacidad autocrítica constructiva.	
CT3 - Ser capaz de trabajar en equipo y de adaptarse a equipos multidisciplinarios e internacionales a diferentes escalas.	
CT4 - Tener capacidad de análisis, de síntesis, de adquirir perspectivas globales y de aplicación de los conocimientos a casos prácticos.	
CT5 - Tener la capacidad de tomar decisiones y de adaptación a situaciones nuevas.	
<b>5.5.1.5.3 ESPECÍFICAS</b>	
CE6 - Comprender las distintas escalas de tiempo y longitud en la Naturaleza y los formalismos físico-matemáticos que se aplican en cada una de ellas.	

CE7 - Comprender las leyes físicas que rigen el comportamiento de sólidos, fluidos y disoluciones en condiciones equilibrio.		
CE8 - Comprender las leyes físicas que rigen el comportamiento de macromoléculas y biopolímeros en condiciones de equilibrio.		
CE9 - Comprender las leyes físicas que rigen el comportamiento de superficies, interfases, nanopartículas y coloides en condiciones de equilibrio.		
CE10 - Comprender las leyes físicas que rigen el comportamiento de sistemas fuera del equilibrio: procesos de relajación y fenómenos de transporte.		
CE11 - Comprender las leyes físicas que rigen el comportamiento de sistemas fuera del equilibrio: reactividad química, procesos de reacción-difusión y cambios de fase en sistemas físico-químicos y bioquímicos.		
CE12 - Comprender las leyes físicas que rigen el comportamiento de sistemas fuera del equilibrio: procesos metabólicos y transducción de señales en procesos a nivel celular.		
CE13 - Dado un material, fenómeno físico o químico o sistema complejo que se quiera modelizar, ser capaz de evaluar y seleccionar las escalas de tiempo y longitud en las que dicho fenómeno tiene lugar.		
CE14 - Dado un material, fenómeno físico o químico o sistema complejo que se quiera modelizar, ser capaz de evaluar y seleccionar cuáles son las mejores técnicas de modelización o simulación para describirlo en función de su escala espacio-temporal.		
<b>5.5.1.6 ACTIVIDADES FORMATIVAS</b>		
<b>ACTIVIDAD FORMATIVA</b>	<b>HORAS</b>	<b>PRESENCIALIDAD</b>
Teoría (presencialidad: 100%)	55	100
Trabajo tutelado (presencialidad: 20%)	25	20
Trabajo autónomo (presencialidad: 0%)	70	0
<b>5.5.1.7 METODOLOGÍAS DOCENTES</b>		
Clases expositivas: En las clases expositivas uno o más estudiantes presentan de forma oral un tema o trabajo, preparado previamente, delante del resto de compañeros del grupo. En ocasiones puede resultar interesante una presentación escrita previa.		
Conferencias: Exposición pública sobre un tema de carácter científico, técnico o cultural llevada a cabo por una persona experta.		
Trabajo escrito: Actividad consistente en la presentación de un documento escrito.		
Actividades de aplicación: Con las actividades de aplicación se consigue contextualizar el aprendizaje teórico a través de su aplicación a un hecho, suceso, situación, dato o fenómeno concreto, seleccionado para que facilite el aprendizaje.		
Resolución de problemas: En la actividad de resolución de problemas, el profesorado presenta una cuestión compleja que el alumnado debe resolver, ya sea trabajando individualmente, o en equipo.		
Clases magistrales: En las clases magistrales se exponen los contenidos de la asignatura de forma oral por parte de un profesor o profesora sin la participación activa del alumnado.		
Ejercicios prácticos: la actividad basada en los ejercicios prácticos consiste en la formulación, análisis, resolución o debate de un problema relacionado con la temática de la asignatura. Dicha actividad tiene como objetivo el aprendizaje mediante la práctica de conocimientos o habilidades programados.		
<b>5.5.1.8 SISTEMAS DE EVALUACIÓN</b>		
<b>SISTEMA DE EVALUACIÓN</b>	<b>PONDERACIÓN MÍNIMA</b>	<b>PONDERACIÓN MÁXIMA</b>
Pruebas escritas: examen, cuestionarios (de elección entre diferentes respuestas, de distinción verdadero/falso, de emparejamiento, ...), pruebas objetivas (respuestas simples, completar la frase, ...), pruebas de ensayo, mapas conceptuales y similares, actividades de aplicación, estudio de casos, resolución de problemas, ...	30.0	80.0
Pruebas orales: entrevistas o exámenes, puestas en común, exposiciones, ...	0.0	20.0
Trabajos realizados por el estudiante: memorias, dossieres, proyectos, carpeta de aprendizaje, ...	20.0	70.0
<b>NIVEL 2: MODELIZACIÓN MOLECULAR</b>		
<b>5.5.1.1 Datos Básicos del Nivel 2</b>		

<b>CARÁCTER</b>	Obligatoria	
<b>ECTS NIVEL 2</b>	6	
<b>DESPLIEGUE TEMPORAL: Semestral</b>		
<b>ECTS Semestral 1</b>	<b>ECTS Semestral 2</b>	<b>ECTS Semestral 3</b>
6		
<b>ECTS Semestral 4</b>	<b>ECTS Semestral 5</b>	<b>ECTS Semestral 6</b>
<b>ECTS Semestral 7</b>	<b>ECTS Semestral 8</b>	<b>ECTS Semestral 9</b>
<b>ECTS Semestral 10</b>	<b>ECTS Semestral 11</b>	<b>ECTS Semestral 12</b>
<b>LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE</b>		
<b>CASTELLANO</b>	<b>CATALÁN</b>	<b>EUSKERA</b>
Sí	Sí	No
<b>GALLEGO</b>	<b>VALENCIANO</b>	<b>INGLÉS</b>
No	No	Sí
<b>FRANCÉS</b>	<b>ALEMÁN</b>	<b>PORTUGUÉS</b>
No	No	No
<b>ITALIANO</b>	<b>OTRAS</b>	
No	No	
<b>NIVEL 3: MODELIZACIÓN MOLECULAR</b>		
<b>5.5.1.1.1 Datos Básicos del Nivel 3</b>		
<b>CARÁCTER</b>	<b>ECTS ASIGNATURA</b>	<b>DESPLIEGUE TEMPORAL</b>
Obligatoria	6	Semestral
<b>DESPLIEGUE TEMPORAL</b>		
<b>ECTS Semestral 1</b>	<b>ECTS Semestral 2</b>	<b>ECTS Semestral 3</b>
6		
<b>ECTS Semestral 4</b>	<b>ECTS Semestral 5</b>	<b>ECTS Semestral 6</b>
<b>ECTS Semestral 7</b>	<b>ECTS Semestral 8</b>	<b>ECTS Semestral 9</b>
<b>ECTS Semestral 10</b>	<b>ECTS Semestral 11</b>	<b>ECTS Semestral 12</b>
<b>LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE</b>		
<b>CASTELLANO</b>	<b>CATALÁN</b>	<b>EUSKERA</b>
Sí	Sí	No
<b>GALLEGO</b>	<b>VALENCIANO</b>	<b>INGLÉS</b>
No	No	Sí
<b>FRANCÉS</b>	<b>ALEMÁN</b>	<b>PORTUGUÉS</b>
No	No	No
<b>ITALIANO</b>	<b>OTRAS</b>	
No	No	
<b>5.5.1.2 RESULTADOS DE APRENDIZAJE</b>		
<ul style="list-style-type: none"> <li>Comprender los fenómenos físicos. Adquirir una buena comprensión de las teorías físicas más importantes, de su estructura lógica y matemática y de su soporte experimental.</li> <li>Conocer los fundamentos de la modelización molecular a diferentes escalas.</li> <li>Conocer la fundamentación de los diferentes métodos de modelización molecular a diferentes escalas.</li> <li>Saber aplicar los conocimientos básicos en el planteamiento de modelos moleculares apropiados.</li> <li>Saber buscar y organizar la información relacionada con la materia en las fuentes primarias y secundarias.</li> <li>Familiarización con distintos casos particulares de modelización a diferentes escalas de longitud y tiempo.</li> <li>Saber resolver problemas prácticos de la aplicación de las teorías físico-matemáticas estudiadas, así como de las magnitudes y unidades empleadas en cada caso.</li> </ul>		
<b>5.5.1.3 CONTENIDOS</b>		
<ul style="list-style-type: none"> <li>Descripción de sistemas atómicos y moleculares a diferentes escalas.</li> </ul>		

- Fundamentos mecánicos y estadísticos de la modelización molecular.
- Modelos cuánticos.
- Dinámica molecular y browniana.
- Método Monte Carlo.
- Campos de fuerza.
- Modelos coarse-graining.
- Modelización del entorno en diferentes colectividades: microcanónico, canónico y macrocanónicos (T,P y T,m).
- Prácticas de modelización molecular en física, química y bioquímica: optimización de campos de fuerza y su aplicación en simulaciones.

#### 5.5.1.4 OBSERVACIONES

#### 5.5.1.5 COMPETENCIAS

##### 5.5.1.5.1 BÁSICAS Y GENERALES

CG2 - Ser capaz de consultar la bibliografía científica, bases de datos y analizar documentos científico-técnicos en inglés.

CG4 - Ser capaz de concebir y diseñar un proceso de investigación.

CG5 - Ser capaz de predecir y controlar la evolución de situaciones complejas mediante el desarrollo de nuevas e innovadoras metodologías de trabajo adaptadas al ámbito científico/investigador, tecnológico o profesional concreto, en general multidisciplinar, en el que se desarrolle su actividad.

CG6 - Desarrollar la autonomía suficiente para participar en proyectos de investigación y colaboraciones científicas o tecnológicas dentro su ámbito temático, en contextos interdisciplinares y, en su caso, con una alta componente de transferencia del conocimiento.

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

CB9 - Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades

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.

##### 5.5.1.5.2 TRANSVERSALES

CT1 - Ser autónomo, dinámico y organizado, con capacidad analítica y de síntesis, con capacidad de análisis crítico y con capacidad de prospectiva.

CT2 - Tener capacidad de autoevaluación y capacidad autocrítica constructiva.

CT3 - Ser capaz de trabajar en equipo y de adaptarse a equipos multidisciplinares e internacionales a diferentes escalas.

CT4 - Tener capacidad de análisis, de síntesis, de adquirir perspectivas globales y de aplicación de los conocimientos a casos prácticos.

##### 5.5.1.5.3 ESPECÍFICAS

CE1 - Ser capaz de trabajar en los entornos informáticos que se emplean en los ámbitos de la modelización atómica y multiescala.

CE3 - Ser capaz de escribir programas en lenguajes de programación de alto nivel y los conceptos básicos de paralelización y optimización que permitan la ejecución paralela de tareas en el contexto de la modelización computacional atómica y multiescala.

CE4 - Ser capaz de escribir scripts para realizar tareas complejas que involucren diferentes programas y comandos del sistema operativo.

CE6 - Comprender las distintas escalas de tiempo y longitud en la Naturaleza y los formalismos físico-matemáticos que se aplican en cada una de ellas.

CE13 - Dado un material, fenómeno físico o químico o sistema complejo que se quiera modelizar, ser capaz de evaluar y seleccionar las escalas de tiempo y longitud en las que dicho fenómeno tiene lugar.

CE14 - Dado un material, fenómeno físico o químico o sistema complejo que se quiera modelizar, ser capaz de evaluar y seleccionar cuáles son las mejores técnicas de modelización o simulación para describirlo en función de su escala espacio-temporal.

CE15 - Comprender los límites computacionales de aplicación de cada metodología estudiada y ser capaz de discernir para cada caso real de estudio qué aproximación es la más apropiada.

CE16 - Ser capaz de usar distintos paquetes informáticos para estudiar la estructura electrónica de moléculas y sólidos, así como sus propiedades de transporte y reactividad química.

CE17 - Ser capaz de usar distintos paquetes informáticos para estudiar la estructura y propiedades de sólidos, fluidos y disoluciones.

CE18 - Ser capaz de usar distintos paquetes informáticos para estudiar la estructura y propiedades de macromoléculas y biopolímeros.		
CE19 - Ser capaz de usar distintos paquetes informáticos para estudiar la estructura y propiedades de superficies, nanopartículas, interfases y coloides.		
CE20 - Ser capaz de usar los distintos paquetes informáticos disponibles que permiten aplicar distintas técnicas de modelización molecular estándar.		
CE21 - Comprender los fundamentos de las técnicas de simulación basadas en campos de fuerza.		
CE22 - Comprender los fundamentos de las técnicas de simulación multiescala basadas en modelos coarse-graining.		
<b>5.5.1.6 ACTIVIDADES FORMATIVAS</b>		
<b>ACTIVIDAD FORMATIVA</b>	<b>HORAS</b>	<b>PRESENCIALIDAD</b>
Teoricopráctica (presencialidad: 100%)	10	100
Prácticas de ordenador (presencialidad: 100%)	45	100
Trabajo tutelado (presencialidad: 20%)	25	20
Trabajo autónomo (presencialidad: 0%)	70	0
<b>5.5.1.7 METODOLOGÍAS DOCENTES</b>		
Clases expositivas: En las clases expositivas uno o más estudiantes presentan de forma oral un tema o trabajo, preparado previamente, delante del resto de compañeros del grupo. En ocasiones puede resultar interesante una presentación escrita previa.		
Trabajo escrito: Actividad consistente en la presentación de un documento escrito.		
Actividades de aplicación: Con las actividades de aplicación se consigue contextualizar el aprendizaje teórico a través de su aplicación a un hecho, suceso, situación, dato o fenómeno concreto, seleccionado para que facilite el aprendizaje.		
Resolución de problemas: En la actividad de resolución de problemas, el profesorado presenta una cuestión compleja que el alumnado debe resolver, ya sea trabajando individualmente, o en equipo.		
Prácticas: Permiten aplicar y configurar, a nivel práctico, la teoría de un ámbito de conocimiento en un contexto concreto.		
Clases magistrales: En las clases magistrales se exponen los contenidos de la asignatura de forma oral por parte de un profesor o profesora sin la participación activa del alumnado.		
Ejercicios prácticos: la actividad basada en los ejercicios prácticos consiste en la formulación, análisis, resolución o debate de un problema relacionado con la temática de la asignatura. Dicha actividad tiene como objetivo el aprendizaje mediante la práctica de conocimientos o habilidades programados.		
<b>5.5.1.8 SISTEMAS DE EVALUACIÓN</b>		
<b>SISTEMA DE EVALUACIÓN</b>	<b>PONDERACIÓN MÍNIMA</b>	<b>PONDERACIÓN MÁXIMA</b>
Pruebas escritas: examen, cuestionarios (de elección entre diferentes respuestas, de distinción verdadero/falso, de emparejamiento, ...), pruebas objetivas (respuestas simples, completar la frase, ...), pruebas de ensayo, mapas conceptuales y similares, actividades de aplicación, estudio de casos, resolución de problemas, ...	0.0	30.0
Pruebas orales: entrevistas o exámenes, puestas en común, exposiciones, ...	0.0	40.0
Trabajos realizados por el estudiante: memorias, dossieres, proyectos, carpeta de aprendizaje, ...	40.0	70.0
<b>NIVEL 2: MÉTODOS MATEMÁTICOS APLICADOS</b>		
<b>5.5.1.1 Datos Básicos del Nivel 2</b>		
<b>CARÁCTER</b>	Optativa	
<b>ECTS NIVEL 2</b>	3	
<b>DESPLIEGUE TEMPORAL: Semestral</b>		

ECTS Semestral 1	ECTS Semestral 2	ECTS Semestral 3
3		
ECTS Semestral 4	ECTS Semestral 5	ECTS Semestral 6
ECTS Semestral 7	ECTS Semestral 8	ECTS Semestral 9
ECTS Semestral 10	ECTS Semestral 11	ECTS Semestral 12
LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
Sí	Sí	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Sí
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
No	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	
LISTADO DE ESPECIALIDADES		
No existen datos		
NIVEL 3: MÉTODOS MATEMÁTICOS PLICADOS		
5.5.1.1.1 Datos Básicos del Nivel 3		
CARÁCTER	ECTS ASIGNATURA	DESPLIEGUE TEMPORAL
Optativa	3	Semestral
DESPLIEGUE TEMPORAL		
ECTS Semestral 1	ECTS Semestral 2	ECTS Semestral 3
	3	
ECTS Semestral 4	ECTS Semestral 5	ECTS Semestral 6
ECTS Semestral 7	ECTS Semestral 8	ECTS Semestral 9
ECTS Semestral 10	ECTS Semestral 11	ECTS Semestral 12
LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
Sí	Sí	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Sí
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
No	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	
LISTADO DE ESPECIALIDADES		
No existen datos		
5.5.1.2 RESULTADOS DE APRENDIZAJE		
<ul style="list-style-type: none"> <li>Conocer los elementos de cálculo avanzado que justifican los métodos numéricos que se usan en modelización y computación científica.</li> </ul>		
5.5.1.3 CONTENIDOS		
<ul style="list-style-type: none"> <li>Ecuaciones diferenciales ordinarias de primer y segundo orden.</li> <li>Teoría de la representación.</li> <li>Teoría de grupos.</li> <li>Cálculo variacional.</li> </ul>		
5.5.1.4 OBSERVACIONES		

<b>5.5.1.5 COMPETENCIAS</b>		
<b>5.5.1.5.1 BÁSICAS Y GENERALES</b>		
CG2 - Ser capaz de consultar la bibliografía científica, bases de datos y analizar documentos científico-técnicos en inglés.		
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 autodirigido o autónomo.		
<b>5.5.1.5.2 TRANSVERSALES</b>		
CT1 - Ser autónomo, dinámico y organizado, con capacidad analítica y de síntesis, con capacidad de análisis crítico y con capacidad de prospectiva.		
CT2 - Tener capacidad de autoevaluación y capacidad autocrítica constructiva.		
CT4 - Tener capacidad de análisis, de síntesis, de adquirir perspectivas globales y de aplicación de los conocimientos a casos prácticos.		
<b>5.5.1.5.3 ESPECÍFICAS</b>		
CE2 - Comprender y saber utilizar las estructuras algorítmicas básicas en el contexto de lenguajes de programación de alto nivel.		
CE5 - Comprender los fundamentos matemáticos de los métodos de modelización más habituales y su implementación numérica computacional.		
<b>5.5.1.6 ACTIVIDADES FORMATIVAS</b>		
ACTIVIDAD FORMATIVA	HORAS	PRESENCIALIDAD
Teoría (presencialidad: 100%)	30	100
Trabajo tutelado (presencialidad: 20%)	15	20
Trabajo autónomo (presencialidad: 0%)	30	0
<b>5.5.1.7 METODOLOGÍAS DOCENTES</b>		
Resolución de problemas: En la actividad de resolución de problemas, el profesorado presenta una cuestión compleja que el alumnado debe resolver, ya sea trabajando individualmente, o en equipo.		
Clases magistrales: En las clases magistrales se exponen los contenidos de la asignatura de forma oral por parte de un profesor o profesora sin la participación activa del alumnado.		
<b>5.5.1.8 SISTEMAS DE EVALUACIÓN</b>		
SISTEMA DE EVALUACIÓN	PONDERACIÓN MÍNIMA	PONDERACIÓN MÁXIMA
Pruebas escritas: examen, cuestionarios (de elección entre diferentes respuestas, de distinción verdadero/falso, de emparejamiento, ...), pruebas objetivas (respuestas simples, completar la frase, ...), pruebas de ensayo, mapas conceptuales y similares, actividades de aplicación, estudio de casos, resolución de problemas, ...	30.0	80.0
Pruebas orales: entrevistas o exámenes, puestas en común, exposiciones, ...	0.0	20.0
Trabajos realizados por el estudiante: memorias, dossieres, proyectos, carpeta de aprendizaje, ...	20.0	60.0
<b>NIVEL 2: HERRAMIENTAS INFORMÁTICAS AVANZADAS</b>		
<b>5.5.1.1 Datos Básicos del Nivel 2</b>		
<b>CARÁCTER</b>	Optativa	
<b>ECTS NIVEL 2</b>	3	

<b>DESPLIEGUE TEMPORAL: Semestral</b>		
ECTS Semestral 1	ECTS Semestral 2	ECTS Semestral 3
	3	
ECTS Semestral 4	ECTS Semestral 5	ECTS Semestral 6
ECTS Semestral 7	ECTS Semestral 8	ECTS Semestral 9
ECTS Semestral 10	ECTS Semestral 11	ECTS Semestral 12
<b>LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE</b>		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
Sí	Sí	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Sí
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
No	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	
<b>LISTADO DE ESPECIALIDADES</b>		
No existen datos		
<b>NIVEL 3: HERRAMIENTAS INFORMÁTICAS AVANZADAS</b>		
<b>5.5.1.1.1 Datos Básicos del Nivel 3</b>		
CARÁCTER	ECTS ASIGNATURA	DESPLIEGUE TEMPORAL
Optativa	3	Semestral
<b>DESPLIEGUE TEMPORAL</b>		
ECTS Semestral 1	ECTS Semestral 2	ECTS Semestral 3
	3	
ECTS Semestral 4	ECTS Semestral 5	ECTS Semestral 6
ECTS Semestral 7	ECTS Semestral 8	ECTS Semestral 9
ECTS Semestral 10	ECTS Semestral 11	ECTS Semestral 12
<b>LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE</b>		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
Sí	Sí	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Sí
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
No	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	
<b>LISTADO DE ESPECIALIDADES</b>		
No existen datos		
<b>5.5.1.2 RESULTADOS DE APRENDIZAJE</b>		
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Saber escribir programas complejos en lenguajes de programación de alto nivel.</li> <li>• Saber escribir scripts complejos en lenguajes de programación de alto nivel.</li> <li>• Conocer diferentes herramientas colaborativas y entornos de desarrollo.</li> <li>• Saber optimizar programas escritos en lenguajes de programación de alto nivel.</li> <li>• Conocer los algoritmos que permiten generar programas que se ejecutan en paralelo.</li> <li>• Saber escribir programas complejos que permitan una ejecución en paralelo.</li> </ul>		

5.5.1.3 CONTENIDOS		
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Programación avanzada en lenguajes de programación de alto nivel.</li> <li>• Programación en paralelo.</li> <li>• Programación de scripts complejos.</li> <li>• Herramientas colaborativas y entornos de desarrollo.</li> </ul>		
5.5.1.4 OBSERVACIONES		
5.5.1.5 COMPETENCIAS		
5.5.1.5.1 BÁSICAS Y GENERALES		
CG2 - Ser capaz de consultar la bibliografía científica, bases de datos y analizar documentos científico-técnicos en inglés.		
CG5 - Ser capaz de predecir y controlar la evolución de situaciones complejas mediante el desarrollo de nuevas e innovadoras metodologías de trabajo adaptadas al ámbito científico/investigador, tecnológico o profesional concreto, en general multidisciplinar, en el que se desarrolle su actividad.		
CG6 - Desarrollar la autonomía suficiente para participar en proyectos de investigación y colaboraciones científicas o tecnológicas dentro su ámbito temático, en contextos interdisciplinarios y, en su caso, con una alta componente de transferencia del conocimiento.		
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 multidisciplinarios) 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.		
5.5.1.5.2 TRANSVERSALES		
CT1 - Ser autónomo, dinámico y organizado, con capacidad analítica y de síntesis, con capacidad de análisis crítico y con capacidad de prospectiva.		
CT2 - Tener capacidad de autoevaluación y capacidad autocrítica constructiva.		
CT4 - Tener capacidad de análisis, de síntesis, de adquirir perspectivas globales y de aplicación de los conocimientos a casos prácticos.		
CT5 - Tener la capacidad de tomar decisiones y de adaptación a situaciones nuevas.		
5.5.1.5.3 ESPECÍFICAS		
CE1 - Ser capaz de trabajar en los entornos informáticos que se emplean en los ámbitos de la modelización atómica y multiescala.		
CE2 - Comprender y saber utilizar las estructuras algorítmicas básicas en el contexto de lenguajes de programación de alto nivel.		
CE3 - Ser capaz de escribir programas en lenguajes de programación de alto nivel y los conceptos básicos de paralelización y optimización que permitan la ejecución paralela de tareas en el contexto de la modelización computacional atómica y multiescala.		
CE4 - Ser capaz de escribir scripts para realizar tareas complejas que involucren diferentes programas y comandos del sistema operativo.		
CE15 - Comprender los límites computacionales de aplicación de cada metodología estudiada y ser capaz de discernir para cada caso real de estudio qué aproximación es la más apropiada.		
5.5.1.6 ACTIVIDADES FORMATIVAS		
ACTIVIDAD FORMATIVA	HORAS	PRESENCIALIDAD
Prácticas de ordenador (presencialidad: 100%)	30	100
Trabajo tutelado (presencialidad: 20%)	10	20
Trabajo autónomo (presencialidad: 0%)	40	0
5.5.1.7 METODOLOGÍAS DOCENTES		
Trabajo en grupo: Actividad de aprendizaje que se tiene que hacer mediante la colaboración entre los miembros de un grupo.		
Trabajo escrito: Actividad consistente en la presentación de un documento escrito.		
Aprendizaje basado en problemas: Se utiliza el aprendizaje basado en problemas como método de promover el aprendizaje a partir de problemas seleccionados de la vida real. Es necesario que cada alumno identifique y analice el problema, formule interrogantes para convertirlos en objetivos de aprendizaje, busque información para darle respuesta e interaccione, socializando así		

este conocimiento. Este tipo de metodología permite adquirir conocimientos conceptuales y desarrollar habilidades y actitudes de manera que se convierte en una estrategia especialmente interesante para alcanzar competencias.

**Resolución de problemas:** En la actividad de resolución de problemas, el profesorado presenta una cuestión compleja que el alumnado debe resolver, ya sea trabajando individualmente, o en equipo.

**Prácticas:** Permiten aplicar y configurar, a nivel práctico, la teoría de un ámbito de conocimiento en un contexto concreto.

**Clases magistrales:** En las clases magistrales se exponen los contenidos de la asignatura de forma oral por parte de un profesor o profesora sin la participación activa del alumnado.

**Ejercicios prácticos:** la actividad basada en los ejercicios prácticos consiste en la formulación, análisis, resolución o debate de un problema relacionado con la temática de la asignatura. Dicha actividad tiene como objetivo el aprendizaje mediante la práctica de conocimientos o habilidades programados.

#### 5.5.1.8 SISTEMAS DE EVALUACIÓN

SISTEMA DE EVALUACIÓN	PONDERACIÓN MÍNIMA	PONDERACIÓN MÁXIMA
Pruebas escritas: examen, cuestionarios (de elección entre diferentes respuestas, de distinción verdadero/falso, de emparejamiento, ...), pruebas objetivas (respuestas simples, completar la frase, ...), pruebas de ensayo, mapas conceptuales y similares, actividades de aplicación, estudio de casos, resolución de problemas, ...	0.0	20.0
Pruebas orales: entrevistas o exámenes, puestas en común, exposiciones, ...	0.0	60.0
Trabajos realizados por el estudiante: memorias, dossieres, proyectos, carpeta de aprendizaje, ...	40.0	80.0

#### NIVEL 2: MECÁNICA CUÁNTICA

##### 5.5.1.1 Datos Básicos del Nivel 2

<b>CARÁCTER</b>	Optativa
<b>ECTS NIVEL 2</b>	6

##### DESPLIEGUE TEMPORAL: Semestral

ECTS Semestral 1	ECTS Semestral 2	ECTS Semestral 3
3	3	
ECTS Semestral 4	ECTS Semestral 5	ECTS Semestral 6
ECTS Semestral 7	ECTS Semestral 8	ECTS Semestral 9
ECTS Semestral 10	ECTS Semestral 11	ECTS Semestral 12

##### LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE

CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
Sí	Sí	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Sí
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
No	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	

##### LISTADO DE ESPECIALIDADES

No existen datos

#### NIVEL 3: ESTRUCTURA ELECTRÓNICA

5.5.1.1.1 Datos Básicos del Nivel 3		
CARÁCTER	ECTS ASIGNATURA	DESPLIEGUE TEMPORAL
Optativa	3	Semestral
DESPLIEGUE TEMPORAL		
ECTS Semestral 1	ECTS Semestral 2	ECTS Semestral 3
3		
ECTS Semestral 4	ECTS Semestral 5	ECTS Semestral 6
ECTS Semestral 7	ECTS Semestral 8	ECTS Semestral 9
ECTS Semestral 10	ECTS Semestral 11	ECTS Semestral 12
LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
Sí	Sí	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Sí
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
No	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	
LISTADO DE ESPECIALIDADES		
No existen datos		
NIVEL 3: DINÁMICA CUÁNTICA		
5.5.1.1.1 Datos Básicos del Nivel 3		
CARÁCTER	ECTS ASIGNATURA	DESPLIEGUE TEMPORAL
Optativa	3	Semestral
DESPLIEGUE TEMPORAL		
ECTS Semestral 1	ECTS Semestral 2	ECTS Semestral 3
	3	
ECTS Semestral 4	ECTS Semestral 5	ECTS Semestral 6
ECTS Semestral 7	ECTS Semestral 8	ECTS Semestral 9
ECTS Semestral 10	ECTS Semestral 11	ECTS Semestral 12
LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
Sí	Sí	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Sí
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
No	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	
LISTADO DE ESPECIALIDADES		
No existen datos		
5.5.1.2 RESULTADOS DE APRENDIZAJE		
ESTRUCTURA ELECTRÓNICA		

- Destacar la importancia del problema electrónico para las aplicaciones de la Mecánica Cuántica en Química.
- Conocer los fundamentos físico-matemáticos de los distintos métodos que se emplean para estudiar la estructura electrónica de sistemas moleculares.
- Conocer los algoritmos que se emplean en distintos esquemas numéricos para resolver de forma aproximada la ecuación de Schrödinger electrónica independiente del tiempo.
- Ser capaz de escribir programas informáticos que implementen algunos de los métodos estudiados para abordar la estructura electrónica de sistemas sencillos.
- Dado un sistema molecular, saber escoger cuál es el método más adecuado para resolver la ecuación de Schrödinger electrónica independiente del tiempo, en función de las características de dicho sistema molecular.
- Tener experiencia en el uso de paquetes informáticos para la resolución aproximada de la ecuación de Schrödinger electrónica independiente del tiempo.

#### DINÁMICA CUÁNTICA

- Conocer las diferentes posibilidades que ofrece la simulación mecano-cuántica de la dinámica de sistemas moleculares.
- Conocer las técnicas más comúnmente empleadas para representar la función de onda nuclear.
- Conocer el principio de incertidumbre de Heisenberg y como éste se manifiesta en un paquete de onda gaussiano.
- Conocer las técnicas mediante las cuales se puede resolver la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo.
- Familiarización con las herramientas de análisis de la función de onda.
- Conocer las aplicaciones de la dinámica cuántica en campos de interés para las ciencias moleculares.
- Saber usar paquetes informáticos para la resolución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo.

### 5.5.1.3 CONTENIDOS

#### ESTRUCTURA ELECTRÓNICA

- Separación movimiento nuclear y electrónico
- Ecuación de Schrödinger electrónica.
- Método Hartree-Fock.
- Combinación lineal de orbitales atómicos.
- Métodos post-Hartree Fock para incluir la correlación electrónica. Interacción de configuraciones, Moller-Plesset, Coupled-Cluster.
- Métodos multiconfiguracionales.
- Teoría del Funcional de la Densidad.
- Análisis de superficies de energía potencial.

#### DINÁMICA CUÁNTICA

- Representación de la función de onda nuclear. Métodos de colocación. Cuadratura gaussiana.
- El paquete de onda gaussiano.
- Resolución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo: métodos dependientes e independientes del tiempo.
- Propagadores.
- Análisis de la función de onda: funciones de correlación.
- Aplicaciones: Espectroscopía, Reactividad, Fotoquímica.
- Métodos avanzados: dinámica cuántica directa, métodos multiconfiguracionales.

### 5.5.1.4 OBSERVACIONES

### 5.5.1.5 COMPETENCIAS

#### 5.5.1.5.1 BÁSICAS Y GENERALES

CG1 - Saber evaluar y seleccionar la teoría científica adecuada y la metodología precisa de sus campos de estudio para formular juicios a partir de información incompleta o limitada incluyendo, cuando sea preciso y pertinente, una reflexión sobre la responsabilidad social o ética ligada a la solución que se proponga en cada caso.

CG2 - Ser capaz de consultar la bibliografía científica, bases de datos y analizar documentos científico-técnicos en inglés.

CG3 - Ser capaz de elaborar informes, presentaciones y publicaciones científicas.

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

CB8 - Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios

CB9 - Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades

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.

#### 5.5.1.5.2 TRANSVERSALES

CT1 - Ser autónomo, dinámico y organizado, con capacidad analítica y de síntesis, con capacidad de análisis crítico y con capacidad de prospectiva.

#### 5.5.1.5.3 ESPECÍFICAS

CE5 - Comprender los fundamentos matemáticos de los métodos de modelización más habituales y su implementación numérica computacional.		
CE6 - Comprender las distintas escalas de tiempo y longitud en la Naturaleza y los formalismos físico-matemáticos que se aplican en cada una de ellas.		
CE10 - Comprender las leyes físicas que rigen el comportamiento de sistemas fuera del equilibrio: procesos de relajación y fenómenos de transporte.		
CE11 - Comprender las leyes físicas que rigen el comportamiento de sistemas fuera del equilibrio: reactividad química, procesos de reacción-difusión y cambios de fase en sistemas físico-químicos y bioquímicos.		
CE13 - Dado un material, fenómeno físico o químico o sistema complejo que se quiera modelizar, ser capaz de evaluar y seleccionar las escalas de tiempo y longitud en las que dicho fenómeno tiene lugar.		
CE16 - Ser capaz de usar distintos paquetes informáticos para estudiar la estructura electrónica de moléculas y sólidos, así como sus propiedades de transporte y reactividad química.		
CE18 - Ser capaz de usar distintos paquetes informáticos para estudiar la estructura y propiedades de macromoléculas y biopolímeros.		
<b>5.5.1.6 ACTIVIDADES FORMATIVAS</b>		
<b>ACTIVIDAD FORMATIVA</b>	<b>HORAS</b>	<b>PRESENCIALIDAD</b>
Teoricopráctica (presencialidad: 100%)	60	100
Trabajo tutelado (presencialidad: 20%)	20	20
Trabajo autónomo (presencialidad: 0%)	80	0
<b>5.5.1.7 METODOLOGÍAS DOCENTES</b>		
Clases expositivas: En las clases expositivas uno o más estudiantes presentan de forma oral un tema o trabajo, preparado previamente, delante del resto de compañeros del grupo. En ocasiones puede resultar interesante una presentación escrita previa.		
Trabajo escrito: Actividad consistente en la presentación de un documento escrito.		
Resolución de problemas: En la actividad de resolución de problemas, el profesorado presenta una cuestión compleja que el alumnado debe resolver, ya sea trabajando individualmente, o en equipo.		
Prácticas: Permiten aplicar y configurar, a nivel práctico, la teoría de un ámbito de conocimiento en un contexto concreto.		
Clases magistrales: En las clases magistrales se exponen los contenidos de la asignatura de forma oral por parte de un profesor o profesora sin la participación activa del alumnado.		
<b>5.5.1.8 SISTEMAS DE EVALUACIÓN</b>		
<b>SISTEMA DE EVALUACIÓN</b>	<b>PONDERACIÓN MÍNIMA</b>	<b>PONDERACIÓN MÁXIMA</b>
Pruebas escritas: examen, cuestionarios (de elección entre diferentes respuestas, de distinción verdadero/falso, de emparejamiento, ...), pruebas objetivas (respuestas simples, completar la frase, ...), pruebas de ensayo, mapas conceptuales y similares, actividades de aplicación, estudio de casos, resolución de problemas, ...	0.0	30.0
Pruebas orales: entrevistas o exámenes, puestas en común, exposiciones, ...	0.0	30.0
Trabajos realizados por el estudiante: memorias, dossieres, proyectos, carpeta de aprendizaje, ...	40.0	70.0
<b>NIVEL 2: MECÁNICA ESTADÍSTICA</b>		
<b>5.5.1.1 Datos Básicos del Nivel 2</b>		
<b>CARÁCTER</b>	Optativa	
<b>ECTS NIVEL 2</b>	6	
<b>DESPLIEGUE TEMPORAL: Semestral</b>		
<b>ECTS Semestral 1</b>	<b>ECTS Semestral 2</b>	<b>ECTS Semestral 3</b>

3	3	
<b>ECTS Semestral 4</b>	<b>ECTS Semestral 5</b>	<b>ECTS Semestral 6</b>
<b>ECTS Semestral 7</b>	<b>ECTS Semestral 8</b>	<b>ECTS Semestral 9</b>
<b>ECTS Semestral 10</b>	<b>ECTS Semestral 11</b>	<b>ECTS Semestral 12</b>
<b>LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE</b>		
<b>CASTELLANO</b>	<b>CATALÁN</b>	<b>EUSKERA</b>
Sí	Sí	No
<b>GALLEGO</b>	<b>VALENCIANO</b>	<b>INGLÉS</b>
No	No	Sí
<b>FRANCÉS</b>	<b>ALEMÁN</b>	<b>PORTUGUÉS</b>
No	No	No
<b>ITALIANO</b>	<b>OTRAS</b>	
No	No	
<b>LISTADO DE ESPECIALIDADES</b>		
No existen datos		
<b>NIVEL 3: FUNDAMENTOS DE MECÁNICA ESTADÍSTICA</b>		
<b>5.5.1.1.1 Datos Básicos del Nivel 3</b>		
<b>CARÁCTER</b>	<b>ECTS ASIGNATURA</b>	<b>DESPLIEGUE TEMPORAL</b>
Optativa	3	Semestral
<b>DESPLIEGUE TEMPORAL</b>		
<b>ECTS Semestral 1</b>	<b>ECTS Semestral 2</b>	<b>ECTS Semestral 3</b>
3		
<b>ECTS Semestral 4</b>	<b>ECTS Semestral 5</b>	<b>ECTS Semestral 6</b>
<b>ECTS Semestral 7</b>	<b>ECTS Semestral 8</b>	<b>ECTS Semestral 9</b>
<b>ECTS Semestral 10</b>	<b>ECTS Semestral 11</b>	<b>ECTS Semestral 12</b>
<b>LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE</b>		
<b>CASTELLANO</b>	<b>CATALÁN</b>	<b>EUSKERA</b>
Sí	Sí	No
<b>GALLEGO</b>	<b>VALENCIANO</b>	<b>INGLÉS</b>
No	No	Sí
<b>FRANCÉS</b>	<b>ALEMÁN</b>	<b>PORTUGUÉS</b>
No	No	No
<b>ITALIANO</b>	<b>OTRAS</b>	
No	No	
<b>LISTADO DE ESPECIALIDADES</b>		
No existen datos		
<b>NIVEL 3: MECÁNICA ESTADÍSTICA DE NO EQUILIBRIO</b>		
<b>5.5.1.1.1 Datos Básicos del Nivel 3</b>		
<b>CARÁCTER</b>	<b>ECTS ASIGNATURA</b>	<b>DESPLIEGUE TEMPORAL</b>
Optativa	3	Semestral
<b>DESPLIEGUE TEMPORAL</b>		
<b>ECTS Semestral 1</b>	<b>ECTS Semestral 2</b>	<b>ECTS Semestral 3</b>
0	3	

ECTS Semestral 4	ECTS Semestral 5	ECTS Semestral 6
ECTS Semestral 7	ECTS Semestral 8	ECTS Semestral 9
ECTS Semestral 10	ECTS Semestral 11	ECTS Semestral 12
LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
Sí	Sí	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Sí
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
No	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	
LISTADO DE ESPECIALIDADES		
No existen datos		
5.5.1.2 RESULTADOS DE APRENDIZAJE		
<p>FUNDAMENTOS DE MECÁNICA ESTADÍSTICA</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Saber describir los sistemas (clásicos y cuánticos) constituidos por un gran número de partículas mediante el espacio de las fases.</li> <li>Conocer los métodos básicos de la Mecánica Estadística para el cálculo de propiedades macroscópicas de equilibrio.</li> <li>Conocer las estadísticas clásicas (Maxwell-Boltzmann) y cuánticas (Fermi-Dirac y Bose-Einstein).</li> <li>Saber resolver sistemas sin interacción mediante el método de la función de partición (gas ideal clásico y cuántico, sistema constituidos por unidades con dos o más estados sin interacción, etc.).</li> </ul> <p>MECÁNICA ESTADÍSTICA DE NO EQUILIBRIO</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Conocer las leyes que regulan la evolución de los sistemas alejados del equilibrio termodinámico.</li> <li>Establecer la fenomenología y las ecuaciones fundamentales. Comprender el papel de las fluctuaciones.</li> <li>Saber buscar y organizar la información relacionada con la materia en las fuentes primarias y secundarias.</li> <li>Familiarización con distintas aproximaciones para el estudio de los sistemas alejados del equilibrio.</li> <li>Saber resolver problemas prácticos de la aplicación de las teorías que describen el comportamiento estadístico de los sistemas fuera de equilibrio.</li> </ul>		
5.5.1.3 CONTENIDOS		
<p>FUNDAMENTOS DE MECÁNICA ESTADÍSTICA</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Introducción histórica.</li> <li>Colektividad microcanónica, entropía y temperatura, gas ideal clásico.</li> <li>Colektividad canónica, energía libre de helmholts, fluctuaciones.</li> <li>Aplicaciones de la colectividad canónica: gas diatómico, sólidos cristalinos, paramagnetismo.</li> <li>Colektividad macrocanónica: fluctuaciones en el número de partículas, equilibrio sólido-vapor.</li> <li>Colektividad isobárica-isoterma: energía libre de Gibbs.</li> <li>Mecánica estadística cuántica, gases ideales cuánticos.</li> <li>Aplicaciones de la estadística de Bose-Einstein.</li> <li>Aplicaciones de la estadística de Fermi-Dirac.</li> </ul> <p>MECÁNICA ESTADÍSTICA DE NO EQUILIBRIO</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Teoría de procesos estocásticos. Movimiento Browniano.</li> <li>Ecuación de Langevin. Ecuación de Fokker-Planck.</li> <li>Teoría cinética. Ecuaciones y modelos cinéticos.</li> <li>Teoría de la respuesta lineal y teorema de fluctuación-disipación.</li> <li>Procesos cinéticos y activados.</li> <li>Aplicaciones multidisciplinares en química y biología.</li> </ul>		
5.5.1.4 OBSERVACIONES		
5.5.1.5 COMPETENCIAS		
5.5.1.5.1 BÁSICAS Y GENERALES		

CG1 - Saber evaluar y seleccionar la teoría científica adecuada y la metodología precisa de sus campos de estudio para formular juicios a partir de información incompleta o limitada incluyendo, cuando sea preciso y pertinente, una reflexión sobre la responsabilidad social o ética ligada a la solución que se proponga en cada caso.		
CG2 - Ser capaz de consultar la bibliografía científica, bases de datos y analizar documentos científico-técnicos en inglés.		
CG3 - Ser capaz de elaborar informes, presentaciones y publicaciones científicas.		
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		
CB8 - Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios		
CB9 - Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades		
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.		
<b>5.5.1.5.2 TRANSVERSALES</b>		
CT1 - Ser autónomo, dinámico y organizado, con capacidad analítica y de síntesis, con capacidad de análisis crítico y con capacidad de prospectiva.		
<b>5.5.1.5.3 ESPECÍFICAS</b>		
CE5 - Comprender los fundamentos matemáticos de los métodos de modelización más habituales y su implementación numérica computacional.		
CE6 - Comprender las distintas escalas de tiempo y longitud en la Naturaleza y los formalismos físico-matemáticos que se aplican en cada una de ellas.		
CE7 - Comprender las leyes físicas que rigen el comportamiento de sólidos, fluidos y disoluciones en condiciones equilibrio.		
CE10 - Comprender las leyes físicas que rigen el comportamiento de sistemas fuera del equilibrio: procesos de relajación y fenómenos de transporte.		
CE11 - Comprender las leyes físicas que rigen el comportamiento de sistemas fuera del equilibrio: reactividad química, procesos de reacción-difusión y cambios de fase en sistemas físico-químicos y bioquímicos.		
CE13 - Dado un material, fenómeno físico o químico o sistema complejo que se quiera modelizar, ser capaz de evaluar y seleccionar las escalas de tiempo y longitud en las que dicho fenómeno tiene lugar.		
<b>5.5.1.6 ACTIVIDADES FORMATIVAS</b>		
<b>ACTIVIDAD FORMATIVA</b>	<b>HORAS</b>	<b>PRESENCIALIDAD</b>
Teoricopráctica (presencialidad: 100%)	60	100
Trabajo tutelado (presencialidad: 20%)	30	20
Trabajo autónomo (presencialidad: 0%)	60	0
<b>5.5.1.7 METODOLOGÍAS DOCENTES</b>		
Trabajo escrito: Actividad consistente en la presentación de un documento escrito.		
Actividades de aplicación: Con las actividades de aplicación se consigue contextualizar el aprendizaje teórico a través de su aplicación a un hecho, suceso, situación, dato o fenómeno concreto, seleccionado para que facilite el aprendizaje.		
Resolución de problemas: En la actividad de resolución de problemas, el profesorado presenta una cuestión compleja que el alumnado debe resolver, ya sea trabajando individualmente, o en equipo.		
Prácticas: Permiten aplicar y configurar, a nivel práctico, la teoría de un ámbito de conocimiento en un contexto concreto.		
Clases magistrales: En las clases magistrales se exponen los contenidos de la asignatura de forma oral por parte de un profesor o profesora sin la participación activa del alumnado.		
Ejercicios prácticos: la actividad basada en los ejercicios prácticos consiste en la formulación, análisis, resolución o debate de un problema relacionado con la temática de la asignatura. Dicha actividad tiene como objetivo el aprendizaje mediante la práctica de conocimientos o habilidades programados.		
<b>5.5.1.8 SISTEMAS DE EVALUACIÓN</b>		

SISTEMA DE EVALUACIÓN	PONDERACIÓN MÍNIMA	PONDERACIÓN MÁXIMA
Pruebas escritas: examen, cuestionarios (de elección entre diferentes respuestas, de distinción verdadero/falso, de emparejamiento, ...), pruebas objetivas (respuestas simples, completar la frase, ...), pruebas de ensayo, mapas conceptuales y similares, actividades de aplicación, estudio de casos, resolución de problemas, ...	0.0	30.0
Pruebas orales: entrevistas o exámenes, puestas en común, exposiciones, ...	0.0	30.0
Trabajos realizados por el estudiante: memorias, dossieres, proyectos, carpeta de aprendizaje, ...	40.0	70.0
<b>NIVEL 2: TÉCNICAS DE SIMULACIÓN AVANZADA</b>		
<b>5.5.1.1 Datos Básicos del Nivel 2</b>		
<b>CARÁCTER</b>	Optativa	
<b>ECTS NIVEL 2</b>	6	
<b>DESPLIEGUE TEMPORAL: Semestral</b>		
<b>ECTS Semestral 1</b>	<b>ECTS Semestral 2</b>	<b>ECTS Semestral 3</b>
	6	
<b>ECTS Semestral 4</b>	<b>ECTS Semestral 5</b>	<b>ECTS Semestral 6</b>
<b>ECTS Semestral 7</b>	<b>ECTS Semestral 8</b>	<b>ECTS Semestral 9</b>
<b>ECTS Semestral 10</b>	<b>ECTS Semestral 11</b>	<b>ECTS Semestral 12</b>
<b>LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE</b>		
<b>CASTELLANO</b>	<b>CATALÁN</b>	<b>EUSKERA</b>
Sí	Sí	No
<b>GALLEGO</b>	<b>VALENCIANO</b>	<b>INGLÉS</b>
No	No	Sí
<b>FRANCÉS</b>	<b>ALEMÁN</b>	<b>PORTUGUÉS</b>
No	No	No
<b>ITALIANO</b>	<b>OTRAS</b>	
No	No	
<b>LISTADO DE ESPECIALIDADES</b>		
No existen datos		
<b>NIVEL 3: MÉTODOS AVANZADOS DE SIMULACIÓN MOLECULAR</b>		
<b>5.5.1.1.1 Datos Básicos del Nivel 3</b>		
<b>CARÁCTER</b>	<b>ECTS ASIGNATURA</b>	<b>DESPLIEGUE TEMPORAL</b>
Optativa	3	Semestral
<b>DESPLIEGUE TEMPORAL</b>		
<b>ECTS Semestral 1</b>	<b>ECTS Semestral 2</b>	<b>ECTS Semestral 3</b>
	3	
<b>ECTS Semestral 4</b>	<b>ECTS Semestral 5</b>	<b>ECTS Semestral 6</b>
<b>ECTS Semestral 7</b>	<b>ECTS Semestral 8</b>	<b>ECTS Semestral 9</b>
<b>ECTS Semestral 10</b>	<b>ECTS Semestral 11</b>	<b>ECTS Semestral 12</b>

<b>LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE</b>		
<b>CASTELLANO</b>	<b>CATALÁN</b>	<b>EUSKERA</b>
Sí	Sí	No
<b>GALLEGO</b>	<b>VALENCIANO</b>	<b>INGLÉS</b>
No	No	Sí
<b>FRANCÉS</b>	<b>ALEMÁN</b>	<b>PORTUGUÉS</b>
No	No	No
<b>ITALIANO</b>	<b>OTRAS</b>	
No	No	
<b>LISTADO DE ESPECIALIDADES</b>		
No existen datos		
<b>NIVEL 3: MULTIESCALA, MÉTODOS COARSE GRAIN Y MÉTODOS MIXTOS</b>		
<b>5.5.1.1.1 Datos Básicos del Nivel 3</b>		
<b>CARÁCTER</b>	<b>ECTS ASIGNATURA</b>	<b>DESPLIEGUE TEMPORAL</b>
Optativa	3	Semestral
<b>DESPLIEGUE TEMPORAL</b>		
<b>ECTS Semestral 1</b>	<b>ECTS Semestral 2</b>	<b>ECTS Semestral 3</b>
	3	
<b>ECTS Semestral 4</b>	<b>ECTS Semestral 5</b>	<b>ECTS Semestral 6</b>
<b>ECTS Semestral 7</b>	<b>ECTS Semestral 8</b>	<b>ECTS Semestral 9</b>
<b>ECTS Semestral 10</b>	<b>ECTS Semestral 11</b>	<b>ECTS Semestral 12</b>
<b>LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE</b>		
<b>CASTELLANO</b>	<b>CATALÁN</b>	<b>EUSKERA</b>
Sí	Sí	No
<b>GALLEGO</b>	<b>VALENCIANO</b>	<b>INGLÉS</b>
No	No	Sí
<b>FRANCÉS</b>	<b>ALEMÁN</b>	<b>PORTUGUÉS</b>
No	No	No
<b>ITALIANO</b>	<b>OTRAS</b>	
No	No	
<b>LISTADO DE ESPECIALIDADES</b>		
No existen datos		
<b>5.5.1.2 RESULTADOS DE APRENDIZAJE</b>		
<p><b>MÉTODOS AVANZADOS DE SIMULACIÓN MOLECULAR</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Conocer la fundamentación de los distintos métodos avanzados de simulación molecular.</li> <li>• Familiarizarse con distintos casos particulares de modelización de sistemas / propiedades / procesos físicos, químicos y bioquímicos.</li> <li>• Saber buscar y organizar la información relacionada con la materia en las fuentes primarias y secundarias.</li> <li>• Saber resolver problemas prácticos de la aplicación de los métodos estudiados.</li> </ul> <p><b>MULTIESCALA, MÉTODOS COARSE GRAIN Y MÉTODOS MIXTOS</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Conocer la fundamentación de los distintos métodos de simulación a escala mesoscópica.</li> <li>• Familiarizarse con distintos casos particulares de modelización de sistemas / propiedades / procesos físicos, químicos y bioquímicos.</li> <li>• Saber buscar y organizar la información relacionada con la materia en las fuentes primarias y secundarias.</li> <li>• Saber resolver problemas prácticos de la aplicación de los métodos estudiados.</li> </ul>		
<b>5.5.1.3 CONTENIDOS</b>		
MÉTODOS AVANZADOS DE SIMULACIÓN MOLECULAR		

- Técnicas avanzadas de Monte Carlo.
- Métodos de "extended ensemble" y "rewriting", "parallel tempering", histogramas y múltiples histogramas. Estimación de energías libres.
- Técnicas avanzadas de dinámica molecular.
- Termostatos y barostatos. Interacciones de largo alcance. Simulación de macromoléculas.
- Dinámica molecular "ab initio" y método de Car-Parrinello.
- Técnicas de Monte Carlo cuántico.

**MULTIESCALA, MÉTODOS COARSE GRAIN Y MÉTODOS MIXTOS**

- Dinámica browniana. Modelos reticulares.
- Dinámica molecular mesoscópica.
- Procesos activados. Cruce de barreras. Transition path sampling.
- Métodos híbridos.
- Aplicaciones: polímeros, proteínas, reactividad enzimática, aglomerados moleculares, membranas, ...

**5.5.1.4 OBSERVACIONES**

**5.5.1.5 COMPETENCIAS**

**5.5.1.5.1 BÁSICAS Y GENERALES**

CG2 - Ser capaz de consultar la bibliografía científica, bases de datos y analizar documentos científico-técnicos en inglés.

CG4 - Ser capaz de concebir y diseñar un proceso de investigación.

CG5 - Ser capaz de predecir y controlar la evolución de situaciones complejas mediante el desarrollo de nuevas e innovadoras metodologías de trabajo adaptadas al ámbito científico/investigador, tecnológico o profesional concreto, en general multidisciplinar, en el que se desarrolle su actividad.

CG6 - Desarrollar la autonomía suficiente para participar en proyectos de investigación y colaboraciones científicas o tecnológicas dentro su ámbito temático, en contextos interdisciplinares y, en su caso, con una alta componente de transferencia del conocimiento.

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 autodirigido o autónomo.

**5.5.1.5.2 TRANSVERSALES**

CT1 - Ser autónomo, dinámico y organizado, con capacidad analítica y de síntesis, con capacidad de análisis crítico y con capacidad de prospectiva.

CT2 - Tener capacidad de autoevaluación y capacidad autocrítica constructiva.

CT3 - Ser capaz de trabajar en equipo y de adaptarse a equipos multidisciplinares e internacionales a diferentes escalas.

CT4 - Tener capacidad de análisis, de síntesis, de adquirir perspectivas globales y de aplicación de los conocimientos a casos prácticos.

CT5 - Tener la capacidad de tomar decisiones y de adaptación a situaciones nuevas.

**5.5.1.5.3 ESPECÍFICAS**

CE1 - Ser capaz de trabajar en los entornos informáticos que se emplean en los ámbitos de la modelización atómica y multiescala.

CE6 - Comprender las distintas escalas de tiempo y longitud en la Naturaleza y los formalismos físico-matemáticos que se aplican en cada una de ellas.

CE13 - Dado un material, fenómeno físico o químico o sistema complejo que se quiera modelizar, ser capaz de evaluar y seleccionar las escalas de tiempo y longitud en las que dicho fenómeno tiene lugar.

CE14 - Dado un material, fenómeno físico o químico o sistema complejo que se quiera modelizar, ser capaz de evaluar y seleccionar cuáles son las mejores técnicas de modelización o simulación para describirlo en función de su escala espacio-temporal.

CE20 - Ser capaz de usar los distintos paquetes informáticos disponibles que permiten aplicar distintas técnicas de modelización molecular estándar.

CE21 - Comprender los fundamentos de las técnicas de simulación basadas en campos de fuerza.

CE22 - Comprender los fundamentos de las técnicas de simulación multiescala basadas en modelos coarse-graining.

**5.5.1.6 ACTIVIDADES FORMATIVAS**

ACTIVIDAD FORMATIVA	HORAS	PRESENCIALIDAD
---------------------	-------	----------------

Prácticas de ordenador (presencialidad: 100%)	48	100
Trabajo tutelado (presencialidad: 20%)	24	20
Trabajo autónomo (presencialidad: 0%)	78	0
<b>5.5.1.7 METODOLOGÍAS DOCENTES</b>		
Trabajo en grupo: Actividad de aprendizaje que se tiene que hacer mediante la colaboración entre los miembros de un grupo.		
Trabajo escrito: Actividad consistente en la presentación de un documento escrito.		
Actividades de aplicación: Con las actividades de aplicación se consigue contextualizar el aprendizaje teórico a través de su aplicación a un hecho, suceso, situación, dato o fenómeno concreto, seleccionado para que facilite el aprendizaje.		
Resolución de problemas: En la actividad de resolución de problemas, el profesorado presenta una cuestión compleja que el alumnado debe resolver, ya sea trabajando individualmente, o en equipo.		
Prácticas: Permiten aplicar y configurar, a nivel práctico, la teoría de un ámbito de conocimiento en un contexto concreto.		
Clases magistrales: En las clases magistrales se exponen los contenidos de la asignatura de forma oral por parte de un profesor o profesora sin la participación activa del alumnado.		
Ejercicios prácticos: la actividad basada en los ejercicios prácticos consiste en la formulación, análisis, resolución o debate de un problema relacionado con la temática de la asignatura. Dicha actividad tiene como objetivo el aprendizaje mediante la práctica de conocimientos o habilidades programados.		
<b>5.5.1.8 SISTEMAS DE EVALUACIÓN</b>		
<b>SISTEMA DE EVALUACIÓN</b>	<b>PONDERACIÓN MÍNIMA</b>	<b>PONDERACIÓN MÁXIMA</b>
Pruebas escritas: examen, cuestionarios (de elección entre diferentes respuestas, de distinción verdadero/falso, de emparejamiento, ...), pruebas objetivas (respuestas simples, completar la frase, ...), pruebas de ensayo, mapas conceptuales y similares, actividades de aplicación, estudio de casos, resolución de problemas, ...	0.0	20.0
Pruebas orales: entrevistas o exámenes, puestas en común, exposiciones, ...	0.0	60.0
Trabajos realizados por el estudiante: memorias, dossieres, proyectos, carpeta de aprendizaje, ...	40.0	80.0
<b>NIVEL 2: MATERIALES</b>		
<b>5.5.1.1 Datos Básicos del Nivel 2</b>		
<b>CARÁCTER</b>	Optativa	
<b>ECTS NIVEL 2</b>	12	
<b>DESPLIEGUE TEMPORAL: Semestral</b>		
<b>ECTS Semestral 1</b>	<b>ECTS Semestral 2</b>	<b>ECTS Semestral 3</b>
3	9	
<b>ECTS Semestral 4</b>	<b>ECTS Semestral 5</b>	<b>ECTS Semestral 6</b>
<b>ECTS Semestral 7</b>	<b>ECTS Semestral 8</b>	<b>ECTS Semestral 9</b>
<b>ECTS Semestral 10</b>	<b>ECTS Semestral 11</b>	<b>ECTS Semestral 12</b>
<b>LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE</b>		
<b>CASTELLANO</b>	<b>CATALÁN</b>	<b>EUSKERA</b>
Sí	Sí	No
<b>GALLEGO</b>	<b>VALENCIANO</b>	<b>INGLÉS</b>
No	No	Sí

FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
No	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	
LISTADO DE ESPECIALIDADES		
No existen datos		
NIVEL 3: MATERIA CONDENSADA		
5.5.1.1.1 Datos Básicos del Nivel 3		
CARÁCTER	ECTS ASIGNATURA	DESPLIEGUE TEMPORAL
Optativa	3	Semestral
DESPLIEGUE TEMPORAL		
ECTS Semestral 1	ECTS Semestral 2	ECTS Semestral 3
3		
ECTS Semestral 4	ECTS Semestral 5	ECTS Semestral 6
ECTS Semestral 7	ECTS Semestral 8	ECTS Semestral 9
ECTS Semestral 10	ECTS Semestral 11	ECTS Semestral 12
LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
Sí	Sí	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Sí
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
No	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	
LISTADO DE ESPECIALIDADES		
No existen datos		
NIVEL 3: ESTRUCTURA ELÉCTRICA EN SÓLIDOS		
5.5.1.1.1 Datos Básicos del Nivel 3		
CARÁCTER	ECTS ASIGNATURA	DESPLIEGUE TEMPORAL
Optativa	3	Semestral
DESPLIEGUE TEMPORAL		
ECTS Semestral 1	ECTS Semestral 2	ECTS Semestral 3
	3	
ECTS Semestral 4	ECTS Semestral 5	ECTS Semestral 6
ECTS Semestral 7	ECTS Semestral 8	ECTS Semestral 9
ECTS Semestral 10	ECTS Semestral 11	ECTS Semestral 12
LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
Sí	Sí	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Sí
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS

No	No	No
<b>ITALIANO</b>	<b>OTRAS</b>	
No	No	
<b>LISTADO DE ESPECIALIDADES</b>		
No existen datos		
<b>NIVEL 3: SUPERFICIES Y CATÁLISIS</b>		
<b>5.5.1.1.1 Datos Básicos del Nivel 3</b>		
<b>CARÁCTER</b>	<b>ECTS ASIGNATURA</b>	<b>DESPLIEGUE TEMPORAL</b>
Optativa	3	Semestral
<b>DESPLIEGUE TEMPORAL</b>		
<b>ECTS Semestral 1</b>	<b>ECTS Semestral 2</b>	<b>ECTS Semestral 3</b>
	3	
<b>ECTS Semestral 4</b>	<b>ECTS Semestral 5</b>	<b>ECTS Semestral 6</b>
<b>ECTS Semestral 7</b>	<b>ECTS Semestral 8</b>	<b>ECTS Semestral 9</b>
<b>ECTS Semestral 10</b>	<b>ECTS Semestral 11</b>	<b>ECTS Semestral 12</b>
<b>Lenguas en las que se imparte</b>		
<b>CASTELLANO</b>	<b>CATALÁN</b>	<b>EUSKERA</b>
Sí	Sí	No
<b>GALLEGO</b>	<b>VALENCIANO</b>	<b>INGLÉS</b>
No	No	Sí
<b>FRANCÉS</b>	<b>ALEMÁN</b>	<b>PORTUGUÉS</b>
No	No	No
<b>ITALIANO</b>	<b>OTRAS</b>	
No	No	
<b>LISTADO DE ESPECIALIDADES</b>		
No existen datos		
<b>NIVEL 3: ESTRUCTURA MOLECULAR Y REACTIVIDAD QUÍMICA</b>		
<b>5.5.1.1.1 Datos Básicos del Nivel 3</b>		
<b>CARÁCTER</b>	<b>ECTS ASIGNATURA</b>	<b>DESPLIEGUE TEMPORAL</b>
Optativa	3	Semestral
<b>DESPLIEGUE TEMPORAL</b>		
<b>ECTS Semestral 1</b>	<b>ECTS Semestral 2</b>	<b>ECTS Semestral 3</b>
	3	
<b>ECTS Semestral 4</b>	<b>ECTS Semestral 5</b>	<b>ECTS Semestral 6</b>
<b>ECTS Semestral 7</b>	<b>ECTS Semestral 8</b>	<b>ECTS Semestral 9</b>
<b>ECTS Semestral 10</b>	<b>ECTS Semestral 11</b>	<b>ECTS Semestral 12</b>
<b>Lenguas en las que se imparte</b>		
<b>CASTELLANO</b>	<b>CATALÁN</b>	<b>EUSKERA</b>
Sí	Sí	No
<b>GALLEGO</b>	<b>VALENCIANO</b>	<b>INGLÉS</b>
No	No	Sí
<b>FRANCÉS</b>	<b>ALEMÁN</b>	<b>PORTUGUÉS</b>
No	No	No

ITALIANO	OTRAS
No	No
<b>LISTADO DE ESPECIALIDADES</b>	
No existen datos	
<b>5.5.1.2 RESULTADOS DE APRENDIZAJE</b>	
<p>MATERIA CONDENSADA</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Conocer las distintas fases de la materia.</li> <li>• Comprender los fenómenos físicos propios de la materia condensada.</li> <li>• Conocer la fundamentación de los distintos modelos físico-matemáticos.</li> <li>• Saber buscar y organizar la información relacionada con la materia en las fuentes primarias y secundarias.</li> <li>• Saber resolver problemas prácticos de la aplicación de las teorías estudiadas.</li> <li>•</li> </ul> <p>ESTRUCTURA ELÉCTRICA EN SÓLIDOS</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Saber buscar e interpretar la información relacionada con la estructura cristalina de los sólidos disponible las fuentes primarias y secundarias.</li> <li>• Saber describir una estructura cristalina a partir de la celda unidad y el grupo espacial se simetría.</li> <li>• Comprender las implicaciones de la periodicidad sobre las propiedades físicas de un sistema cristalino.</li> <li>• Conocer la fundamentación de los distintos modelos monoeléctricos para la descripción de la estructura electrónica de un sólido cristalino.</li> <li>• Saber utilizar adecuadamente el lenguaje de la teoría de bandas.</li> <li>• Saber resolver problemas prácticos de la aplicación de las aproximaciones monoeléctricas para describir la estructura de bandas de un sólido.</li> <li>• Conocer las ventajas y las limitaciones de los diferentes tipos de modelos estructurales locales y periódicos para estudiar la estructura electrónica de los sistemas cristalinos.</li> </ul> <p>SUPERFICIES Y CATÁLISIS</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Distinguir los diferentes tipos de catálisis.</li> <li>• Comprender la reactividad catalítica desde un punto de vista molecular.</li> <li>• Reconocer las etapas fundamentales de una reacción química.</li> <li>• Conocer los modelos estructurales de una reacción química.</li> <li>• Utilizar las superficies de potencial para caracterizar ciclos catalíticos.</li> </ul> <p>ESTRUCTURA MOLECULAR Y REACTIVIDAD QUÍMICA</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Ser capaz de extraer información sobre el enlace químico de una molécula a partir de los resultados de un cálculo cuántico.</li> <li>• Entender qué es una superficie de energía potencial y la relación de su topología con la reactividad química de un sistema.</li> <li>• Saber caracterizar una superficie de potencial mediante la localización de sus puntos estacionarios.</li> <li>• Ser capaz de aplicar eficazmente las herramientas de la química cuántica para el estudio de la estructura electrónica y la reactividad de sistemas químicos.</li> </ul>	
<b>5.5.1.3 CONTENIDOS</b>	
<p>MATERIA CONDENSADA</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Fases de la Materia. Estructura y simetría.</li> <li>• Teorías de campo. Ginzburg-Landau. Excitaciones colectivas. Defectos topológicos.</li> <li>• Grupo de Renormalización en materia condensada.</li> <li>• Transiciones de fase inducidas por desorden.</li> <li>• Materia cuántica. Gases cuánticos, superfluidez y condensados de Bose-Einstein.</li> <li>• Gases de Fermi. Superconductividad.</li> </ul> <p>ESTRUCTURA ELÉCTRICA EN SÓLIDOS</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Introducción. Modelización de materiales: sistemas, modelos, propiedades e interdisciplinaridad.</li> <li>• Tipos de sólidos y propiedades. Tipo de enlace. Propiedades. Estructuras ordenadas y desordenadas. Sólidos cristalinos y defectos.</li> <li>• Simetría en los sistemas periódicos: Cristales y retículos. Simetría traslacional, simetría puntual y grupos espaciales.</li> <li>• Red recíproca y zonas de Brillouin. Teorema de Bloch y funciones de Bloch.</li> <li>• Sistemas de dimensionalidad reducida. Superficies. Polímeros. Defectos en sólidos.</li> <li>• Teoría de bandas. Ecuación de Schrödinger y teorema de Bloch. Bases y simplificaciones.</li> <li>• Modelos monoeléctricos: del gas de electrones a los métodos basados en la teoría del funcional de la densidad.</li> <li>• Estructura de bandas y densidad de estados. Energía de Fermi.</li> <li>• Estructura de bandas de sólidos simples.</li> </ul> <p>SUPERFICIES Y CATÁLISIS</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Concepto de catálisis y tipos.</li> <li>• Catálisis Homogénea. Mecanismos de Reacciones catalíticas. Modelización Molecular: efectos de disolvente, entorno. Catálisis asimétrica.</li> <li>• Procesos en la superficie de los sólidos. Modelos de superficie. Función de trabajo. Adsorción desde el punto de vista molecular. Movilidad y difusión.</li> <li>• Catálisis Heterogénea. Reactividad de Superficies de Sólidos. Dinámica molecular en superficies.</li> <li>• Casos Prácticos.</li> </ul>	

**ESTRUCTURA MOLECULAR Y REACTIVIDAD QUÍMICA**

- Densidad electrónica y descripción cuantitativa del enlace.
- Aproximación de Born-Oppenheimer - Hamiltoniano molecular. Superficie de energía potencial (PES).
- Características topológicas de PES adiabáticas y no-adiabáticas.
- Caminos de reacción y su relación con los Mecanismos de Reacción. Coordenada de reacción.
- Algoritmos de optimización de geometría - Localización de mínimos en PES. Localización de estados de transición.
- Reactividad química - Uso de programas de cálculo cuántico para estudiar el mecanismo de una reacción química dada.

**5.5.1.4 OBSERVACIONES**

**5.5.1.5 COMPETENCIAS**

**5.5.1.5.1 BÁSICAS Y GENERALES**

CG1 - Saber evaluar y seleccionar la teoría científica adecuada y la metodología precisa de sus campos de estudio para formular juicios a partir de información incompleta o limitada incluyendo, cuando sea preciso y pertinente, una reflexión sobre la responsabilidad social o ética ligada a la solución que se proponga en cada caso.

CG2 - Ser capaz de consultar la bibliografía científica, bases de datos y analizar documentos científico-técnicos en inglés.

CG3 - Ser capaz de elaborar informes, presentaciones y publicaciones científicas.

CG4 - Ser capaz de concebir y diseñar un proceso de investigación.

CG5 - Ser capaz de predecir y controlar la evolución de situaciones complejas mediante el desarrollo de nuevas e innovadoras metodologías de trabajo adaptadas al ámbito científico/investigador, tecnológico o profesional concreto, en general multidisciplinar, en el que se desarrolle su actividad.

CG6 - Desarrollar la autonomía suficiente para participar en proyectos de investigación y colaboraciones científicas o tecnológicas dentro su ámbito temático, en contextos interdisciplinares y, en su caso, con una alta componente de transferencia del conocimiento.

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

CB9 - Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades

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.

**5.5.1.5.2 TRANSVERSALES**

CT1 - Ser autónomo, dinámico y organizado, con capacidad analítica y de síntesis, con capacidad de análisis crítico y con capacidad de prospectiva.

CT5 - Tener la capacidad de tomar decisiones y de adaptación a situaciones nuevas.

**5.5.1.5.3 ESPECÍFICAS**

CE6 - Comprender las distintas escalas de tiempo y longitud en la Naturaleza y los formalismos físico-matemáticos que se aplican en cada una de ellas.

CE7 - Comprender las leyes físicas que rigen el comportamiento de sólidos, fluidos y disoluciones en condiciones equilibrio.

CE9 - Comprender las leyes físicas que rigen el comportamiento de superficies, interfases, nanopartículas y coloides en condiciones de equilibrio.

CE10 - Comprender las leyes físicas que rigen el comportamiento de sistemas fuera del equilibrio: procesos de relajación y fenómenos de transporte.

CE11 - Comprender las leyes físicas que rigen el comportamiento de sistemas fuera del equilibrio: reactividad química, procesos de reacción-difusión y cambios de fase en sistemas físico-químicos y bioquímicos.

CE13 - Dado un material, fenómeno físico o químico o sistema complejo que se quiera modelizar, ser capaz de evaluar y seleccionar las escalas de tiempo y longitud en las que dicho fenómeno tiene lugar.

CE14 - Dado un material, fenómeno físico o químico o sistema complejo que se quiera modelizar, ser capaz de evaluar y seleccionar cuáles son las mejores técnicas de modelización o simulación para describirlo en función de su escala espacio-temporal.

CE16 - Ser capaz de usar distintos paquetes informáticos para estudiar la estructura electrónica de moléculas y sólidos, así como sus propiedades de transporte y reactividad química.

**5.5.1.6 ACTIVIDADES FORMATIVAS**

ACTIVIDAD FORMATIVA	HORAS	PRESENCIALIDAD
Teoricopráctica (presencialidad: 100%)	112	100
Trabajo tutelado (presencialidad: 20%)	48	20
Trabajo autónomo (presencialidad: 0%)	140	0
<b>5.5.1.7 METODOLOGÍAS DOCENTES</b>		
Clases expositivas: En las clases expositivas uno o más estudiantes presentan de forma oral un tema o trabajo, preparado previamente, delante del resto de compañeros del grupo. En ocasiones puede resultar interesante una presentación escrita previa.		
Trabajo escrito: Actividad consistente en la presentación de un documento escrito.		
Actividades de aplicación: Con las actividades de aplicación se consigue contextualizar el aprendizaje teórico a través de su aplicación a un hecho, suceso, situación, dato o fenómeno concreto, seleccionado para que facilite el aprendizaje.		
Resolución de problemas: En la actividad de resolución de problemas, el profesorado presenta una cuestión compleja que el alumnado debe resolver, ya sea trabajando individualmente, o en equipo.		
Prácticas: Permiten aplicar y configurar, a nivel práctico, la teoría de un ámbito de conocimiento en un contexto concreto.		
Clases magistrales: En las clases magistrales se exponen los contenidos de la asignatura de forma oral por parte de un profesor o profesora sin la participación activa del alumnado.		
Ejercicios prácticos: la actividad basada en los ejercicios prácticos consiste en la formulación, análisis, resolución o debate de un problema relacionado con la temática de la asignatura. Dicha actividad tiene como objetivo el aprendizaje mediante la práctica de conocimientos o habilidades programados.		
<b>5.5.1.8 SISTEMAS DE EVALUACIÓN</b>		
SISTEMA DE EVALUACIÓN	PONDERACIÓN MÍNIMA	PONDERACIÓN MÁXIMA
Pruebas escritas: examen, cuestionarios (de elección entre diferentes respuestas, de distinción verdadero/falso, de emparejamiento, ...), pruebas objetivas (respuestas simples, completar la frase, ...), pruebas de ensayo, mapas conceptuales y similares, actividades de aplicación, estudio de casos, resolución de problemas, ...	0.0	30.0
Pruebas orales: entrevistas o exámenes, puestas en común, exposiciones, ...	0.0	60.0
Trabajos realizados por el estudiante: memorias, dossieres, proyectos, carpeta de aprendizaje, ...	20.0	80.0
<b>NIVEL 2: SOFT MATTER Y SISTEMAS COMPLEJOS</b>		
<b>5.5.1.1 Datos Básicos del Nivel 2</b>		
<b>CARÁCTER</b>	Optativa	
<b>ECTS NIVEL 2</b>	12	
<b>DESPLIEGUE TEMPORAL: Semestral</b>		
<b>ECTS Semestral 1</b>	<b>ECTS Semestral 2</b>	<b>ECTS Semestral 3</b>
	12	
<b>ECTS Semestral 4</b>	<b>ECTS Semestral 5</b>	<b>ECTS Semestral 6</b>
<b>ECTS Semestral 7</b>	<b>ECTS Semestral 8</b>	<b>ECTS Semestral 9</b>
<b>ECTS Semestral 10</b>	<b>ECTS Semestral 11</b>	<b>ECTS Semestral 12</b>
<b>LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE</b>		
<b>CASTELLANO</b>	<b>CATALÁN</b>	<b>EUSKERA</b>
Sí	Sí	No
<b>GALLEGO</b>	<b>VALENCIANO</b>	<b>INGLÉS</b>

No	No	Sí
<b>FRANCÉS</b>	<b>ALEMÁN</b>	<b>PORTUGUÉS</b>
No	No	No
<b>ITALIANO</b>	<b>OTRAS</b>	
No	No	
<b>LISTADO DE ESPECIALIDADES</b>		
No existen datos		
<b>NIVEL 3: SOFT MATTER</b>		
<b>5.5.1.1.1 Datos Básicos del Nivel 3</b>		
<b>CARÁCTER</b>	<b>ECTS ASIGNATURA</b>	<b>DESPLIEGUE TEMPORAL</b>
Optativa	3	Semestral
<b>DESPLIEGUE TEMPORAL</b>		
<b>ECTS Semestral 1</b>	<b>ECTS Semestral 2</b>	<b>ECTS Semestral 3</b>
	3	
<b>ECTS Semestral 4</b>	<b>ECTS Semestral 5</b>	<b>ECTS Semestral 6</b>
<b>ECTS Semestral 7</b>	<b>ECTS Semestral 8</b>	<b>ECTS Semestral 9</b>
<b>ECTS Semestral 10</b>	<b>ECTS Semestral 11</b>	<b>ECTS Semestral 12</b>
<b>LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE</b>		
<b>CASTELLANO</b>	<b>CATALÁN</b>	<b>EUSKERA</b>
Sí	Sí	No
<b>GALLEGO</b>	<b>VALENCIANO</b>	<b>INGLÉS</b>
No	No	Sí
<b>FRANCÉS</b>	<b>ALEMÁN</b>	<b>PORTUGUÉS</b>
No	No	No
<b>ITALIANO</b>	<b>OTRAS</b>	
No	No	
<b>LISTADO DE ESPECIALIDADES</b>		
No existen datos		
<b>NIVEL 3: SISTEMAS COMPLEJOS</b>		
<b>5.5.1.1.1 Datos Básicos del Nivel 3</b>		
<b>CARÁCTER</b>	<b>ECTS ASIGNATURA</b>	<b>DESPLIEGUE TEMPORAL</b>
Optativa	3	Semestral
<b>DESPLIEGUE TEMPORAL</b>		
<b>ECTS Semestral 1</b>	<b>ECTS Semestral 2</b>	<b>ECTS Semestral 3</b>
	3	
<b>ECTS Semestral 4</b>	<b>ECTS Semestral 5</b>	<b>ECTS Semestral 6</b>
<b>ECTS Semestral 7</b>	<b>ECTS Semestral 8</b>	<b>ECTS Semestral 9</b>
<b>ECTS Semestral 10</b>	<b>ECTS Semestral 11</b>	<b>ECTS Semestral 12</b>
<b>LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE</b>		
<b>CASTELLANO</b>	<b>CATALÁN</b>	<b>EUSKERA</b>
Sí	Sí	No
<b>GALLEGO</b>	<b>VALENCIANO</b>	<b>INGLÉS</b>
No	No	Sí

<b>FRANCÉS</b>	<b>ALEMÁN</b>	<b>PORTUGUÉS</b>
No	No	No
<b>ITALIANO</b>	<b>OTRAS</b>	
No	No	
<b>LISTADO DE ESPECIALIDADES</b>		
No existen datos		
<b>NIVEL 3: BIOLOGIA DE SISTEMAS COMPUTACIONAL</b>		
<b>5.5.1.1.1 Datos Básicos del Nivel 3</b>		
<b>CARÁCTER</b>	<b>ECTS ASIGNATURA</b>	<b>DESPLIEGUE TEMPORAL</b>
Optativa	3	Semestral
<b>DESPLIEGUE TEMPORAL</b>		
<b>ECTS Semestral 1</b>	<b>ECTS Semestral 2</b>	<b>ECTS Semestral 3</b>
	3	
<b>ECTS Semestral 4</b>	<b>ECTS Semestral 5</b>	<b>ECTS Semestral 6</b>
<b>ECTS Semestral 7</b>	<b>ECTS Semestral 8</b>	<b>ECTS Semestral 9</b>
<b>ECTS Semestral 10</b>	<b>ECTS Semestral 11</b>	<b>ECTS Semestral 12</b>
<b>LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE</b>		
<b>CASTELLANO</b>	<b>CATALÁN</b>	<b>EUSKERA</b>
Sí	Sí	No
<b>GALLEGO</b>	<b>VALENCIANO</b>	<b>INGLÉS</b>
No	No	Sí
<b>FRANCÉS</b>	<b>ALEMÁN</b>	<b>PORTUGUÉS</b>
No	No	No
<b>ITALIANO</b>	<b>OTRAS</b>	
No	No	
<b>LISTADO DE ESPECIALIDADES</b>		
No existen datos		
<b>NIVEL 3: BIOQUIMICA COMPUTACIONAL</b>		
<b>5.5.1.1.1 Datos Básicos del Nivel 3</b>		
<b>CARÁCTER</b>	<b>ECTS ASIGNATURA</b>	<b>DESPLIEGUE TEMPORAL</b>
Optativa	3	Semestral
<b>DESPLIEGUE TEMPORAL</b>		
<b>ECTS Semestral 1</b>	<b>ECTS Semestral 2</b>	<b>ECTS Semestral 3</b>
	3	
<b>ECTS Semestral 4</b>	<b>ECTS Semestral 5</b>	<b>ECTS Semestral 6</b>
<b>ECTS Semestral 7</b>	<b>ECTS Semestral 8</b>	<b>ECTS Semestral 9</b>
<b>ECTS Semestral 10</b>	<b>ECTS Semestral 11</b>	<b>ECTS Semestral 12</b>
<b>LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE</b>		
<b>CASTELLANO</b>	<b>CATALÁN</b>	<b>EUSKERA</b>
Sí	Sí	No
<b>GALLEGO</b>	<b>VALENCIANO</b>	<b>INGLÉS</b>
No	No	Sí
<b>FRANCÉS</b>	<b>ALEMÁN</b>	<b>PORTUGUÉS</b>

No	No	No
<b>ITALIANO</b>	<b>OTRAS</b>	
No	No	
<b>LISTADO DE ESPECIALIDADES</b>		
No existen datos		
<b>5.5.1.2 RESULTADOS DE APRENDIZAJE</b>		
<p><b>SOFT MATTER</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Ser capaz de utilizar las diferentes unidades de medida para cuantificar los fenómenos asociados a la estructura y propiedades de las macromoléculas y biopolímeros.</li> <li>• Ser capaz de discernir el tipo de fenómeno coloidal asociado a la mayoría de procesos fisicoquímicos que se pueden presentar en la vida diaria.</li> <li>• Ser capaz de cuantificar y dar ordenes de magnitud a las principales fuerzas asociados a los procesos coloidales.</li> <li>• Comprender el concepto de estabilización cinética de las dispersiones coloidales así como conocer los diferentes tipos que se pueden encontrar.</li> <li>• Conocer algunos ejemplos de coloides de asociación, emulsiones y espumas que más fácilmente se pueden encontrar en la vida diaria.</li> </ul> <p><b>SISTEMAS COMPLEJOS</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Entender la estabilidad de sistemas de ecuaciones diferenciales acopladas que representan los sistemas dinámicos.</li> <li>• Comprender la importancia y la ubicuidad de los comportamientos libres de escala</li> <li>• Ser capaz de entender la generalización de sistema dinámicos a considerar dependencias espaciales, y las estructuras que emergen y que caracterizan a un sistema como complejo.</li> <li>• Tener una visión general de la moderna teoría de redes, con algunas de sus aplicaciones a diferentes campos.</li> </ul> <p><b>BIOLOGIA DE SISTEMAS COMPUTACIONAL</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Ser capaz de comprender las diferentes aproximaciones y niveles de descripción de la Biología de Sistemas como nueva visión que engloba los diferentes procesos biológicos.</li> <li>• Ser capaz de comprender y aplicar los diferentes modelos teóricos y de simulación de los procesos enzimáticos básicos para el metabolismo, con especial énfasis en su regulación y control.</li> <li>• Ser capaz de entender los fundamentos que hay en los modelos basados en balances de masas a escala genómica.</li> <li>• Ser capaz de comprender los fundamentos en los que se basan los procesos de señalización celular.</li> </ul> <p><b>BIOQUIMICA COMPUTACIONAL</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Conocer las principales características de la estructura de las moléculas biológicas.</li> <li>• Conocer las interacciones que determinan la estructura de las moléculas biológicas.</li> <li>• Comprender las bases teóricas de los métodos empleados en la simulación de biomoléculas.</li> <li>• Saber aplicar las técnicas básicas de modelización molecular a casos sencillos.</li> <li>• Saber seleccionar la metodología adecuada para el problema de modelización planteado.</li> </ul>		
<b>5.5.1.3 CONTENIDOS</b>		
<p><b>SOFT MATTER</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Estructura y propiedades de macromoléculas.</li> <li>• Biopolímeros.</li> <li>• Dispersiones coloidales.</li> <li>• Propiedades de las dispersiones coloidales. Estabilidad coloidal.</li> <li>• Coloides de asociación: Micelas, membranas, emulsiones, espumas, cristales líquidos.</li> </ul> <p><b>SISTEMAS COMPLEJOS</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Introducción a los sistemas complejos: sistemas dinámicos y leyes de escala.</li> <li>• Estructuras espacio-temporales.</li> <li>• Introducción a las redes complejas: estructura y aplicaciones.</li> </ul> <p><b>BIOLOGIA DE SISTEMAS COMPUTACIONAL</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Regulación del metabolismo.</li> <li>• Análisis de balance de flujo en el metabolismo.</li> <li>• Procesos de señalización celular y de regulación génica.</li> </ul> <p><b>BIOQUIMICA COMPUTACIONAL</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Estructura y función del DNA y RNA.</li> <li>• Estructura y función de proteínas.</li> <li>• Plegamiento de proteínas.</li> <li>• Reacciones enzimáticas.</li> </ul>		

<ul style="list-style-type: none"> <li>• Reconocimiento proteína-ligando y proteína-proteína.</li> <li>• Diseño de fármacos asistido por ordenador.</li> </ul>
<b>5.5.1.4 OBSERVACIONES</b>
<b>5.5.1.5 COMPETENCIAS</b>
<b>5.5.1.5.1 BÁSICAS Y GENERALES</b>
CG1 - Saber evaluar y seleccionar la teoría científica adecuada y la metodología precisa de sus campos de estudio para formular juicios a partir de información incompleta o limitada incluyendo, cuando sea preciso y pertinente, una reflexión sobre la responsabilidad social o ética ligada a la solución que se proponga en cada caso.
CG2 - Ser capaz de consultar la bibliografía científica, bases de datos y analizar documentos científico-técnicos en inglés.
CG3 - Ser capaz de elaborar informes, presentaciones y publicaciones científicas.
CG4 - Ser capaz de concebir y diseñar un proceso de investigación.
CG5 - Ser capaz de predecir y controlar la evolución de situaciones complejas mediante el desarrollo de nuevas e innovadoras metodologías de trabajo adaptadas al ámbito científico/investigador, tecnológico o profesional concreto, en general multidisciplinar, en el que se desarrolle su actividad.
CG6 - Desarrollar la autonomía suficiente para participar en proyectos de investigación y colaboraciones científicas o tecnológicas dentro su ámbito temático, en contextos interdisciplinarios y, en su caso, con una alta componente de transferencia del conocimiento.
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
CB9 - Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades
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.
<b>5.5.1.5.2 TRANSVERSALES</b>
CT1 - Ser autónomo, dinámico y organizado, con capacidad analítica y de síntesis, con capacidad de análisis crítico y con capacidad de prospectiva.
CT3 - Ser capaz de trabajar en equipo y de adaptarse a equipos multidisciplinares e internacionales a diferentes escalas.
CT5 - Tener la capacidad de tomar decisiones y de adaptación a situaciones nuevas.
<b>5.5.1.5.3 ESPECÍFICAS</b>
CE3 - Ser capaz de escribir programas en lenguajes de programación de alto nivel y los conceptos básicos de paralelización y optimización que permitan la ejecución paralela de tareas en el contexto de la modelización computacional atómica y multiescala.
CE6 - Comprender las distintas escalas de tiempo y longitud en la Naturaleza y los formalismos físico-matemáticos que se aplican en cada una de ellas.
CE8 - Comprender las leyes físicas que rigen el comportamiento de macromoléculas y biopolímeros en condiciones de equilibrio.
CE9 - Comprender las leyes físicas que rigen el comportamiento de superficies, interfases, nanopartículas y coloides en condiciones de equilibrio.
CE10 - Comprender las leyes físicas que rigen el comportamiento de sistemas fuera del equilibrio: procesos de relajación y fenómenos de transporte.
CE11 - Comprender las leyes físicas que rigen el comportamiento de sistemas fuera del equilibrio: reactividad química, procesos de reacción-difusión y cambios de fase en sistemas físico-químicos y bioquímicos.
CE12 - Comprender las leyes físicas que rigen el comportamiento de sistemas fuera del equilibrio: procesos metabólicos y transducción de señales en procesos a nivel celular.
CE13 - Dado un material, fenómeno físico o químico o sistema complejo que se quiera modelizar, ser capaz de evaluar y seleccionar las escalas de tiempo y longitud en las que dicho fenómeno tiene lugar.
CE18 - Ser capaz de usar distintos paquetes informáticos para estudiar la estructura y propiedades de macromoléculas y biopolímeros.
CE19 - Ser capaz de usar distintos paquetes informáticos para estudiar la estructura y propiedades de superficies, nanopartículas, interfases y coloides.

CE20 - Ser capaz de usar los distintos paquetes informáticos disponibles que permiten aplicar distintas técnicas de modelización molecular estándar.		
CE21 - Comprender los fundamentos de las técnicas de simulación basadas en campos de fuerza.		
CE22 - Comprender los fundamentos de las técnicas de simulación multiescala basadas en modelos coarse-graining.		
<b>5.5.1.6 ACTIVIDADES FORMATIVAS</b>		
<b>ACTIVIDAD FORMATIVA</b>	<b>HORAS</b>	<b>PRESENCIALIDAD</b>
Teoricopráctica (presencialidad: 100%)	112	100
Trabajo tutelado (presencialidad: 20%)	48	20
Trabajo autónomo (presencialidad: 0%)	140	0
<b>5.5.1.7 METODOLOGÍAS DOCENTES</b>		
Clases expositivas: En las clases expositivas uno o más estudiantes presentan de forma oral un tema o trabajo, preparado previamente, delante del resto de compañeros del grupo. En ocasiones puede resultar interesante una presentación escrita previa.		
Trabajo escrito: Actividad consistente en la presentación de un documento escrito.		
Actividades de aplicación: Con las actividades de aplicación se consigue contextualizar el aprendizaje teórico a través de su aplicación a un hecho, suceso, situación, dato o fenómeno concreto, seleccionado para que facilite el aprendizaje.		
Prácticas: Permiten aplicar y configurar, a nivel práctico, la teoría de un ámbito de conocimiento en un contexto concreto.		
Clases magistrales: En las clases magistrales se exponen los contenidos de la asignatura de forma oral por parte de un profesor o profesora sin la participación activa del alumnado.		
Ejercicios prácticos: la actividad basada en los ejercicios prácticos consiste en la formulación, análisis, resolución o debate de un problema relacionado con la temática de la asignatura. Dicha actividad tiene como objetivo el aprendizaje mediante la práctica de conocimientos o habilidades programados.		
<b>5.5.1.8 SISTEMAS DE EVALUACIÓN</b>		
<b>SISTEMA DE EVALUACIÓN</b>	<b>PONDERACIÓN MÍNIMA</b>	<b>PONDERACIÓN MÁXIMA</b>
Pruebas escritas: examen, cuestionarios (de elección entre diferentes respuestas, de distinción verdadero/falso, de emparejamiento, ...), pruebas objetivas (respuestas simples, completar la frase, ...), pruebas de ensayo, mapas conceptuales y similares, actividades de aplicación, estudio de casos, resolución de problemas, ...	0.0	30.0
Pruebas orales: entrevistas o exámenes, puestas en común, exposiciones, ...	0.0	60.0
Trabajos realizados por el estudiante: memorias, dossieres, proyectos, carpeta de aprendizaje, ...	20.0	80.0
<b>NIVEL 2: TRABAJO DE FIN DE MÁSTER</b>		
<b>5.5.1.1 Datos Básicos del Nivel 2</b>		
<b>CARÁCTER</b>	Trabajo Fin de Grado / Máster	
<b>ECTS NIVEL 2</b>	18	
<b>DESPLIEGUE TEMPORAL: Semestral</b>		
<b>ECTS Semestral 1</b>	<b>ECTS Semestral 2</b>	<b>ECTS Semestral 3</b>
	18	
<b>ECTS Semestral 4</b>	<b>ECTS Semestral 5</b>	<b>ECTS Semestral 6</b>
<b>ECTS Semestral 7</b>	<b>ECTS Semestral 8</b>	<b>ECTS Semestral 9</b>
<b>ECTS Semestral 10</b>	<b>ECTS Semestral 11</b>	<b>ECTS Semestral 12</b>
<b>LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE</b>		

CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
Sí	Sí	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Sí
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
No	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	
LISTADO DE ESPECIALIDADES		
No existen datos		
NIVEL 3: TRABAJO DE FIN DE MÁSTER		
5.5.1.1.1 Datos Básicos del Nivel 3		
CARÁCTER	ECTS ASIGNATURA	DESPLIEGUE TEMPORAL
Trabajo Fin de Grado / Máster	18	Semestral
DESPLIEGUE TEMPORAL		
ECTS Semestral 1	ECTS Semestral 2	ECTS Semestral 3
	18	
ECTS Semestral 4	ECTS Semestral 5	ECTS Semestral 6
ECTS Semestral 7	ECTS Semestral 8	ECTS Semestral 9
ECTS Semestral 10	ECTS Semestral 11	ECTS Semestral 12
LENGUAS EN LAS QUE SE IMPARTE		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
Sí	Sí	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Sí
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
No	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	
5.5.1.2 RESULTADOS DE APRENDIZAJE		
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Adquirir versatilidad en la aplicación inteligente de los conocimientos teóricos e informáticos aprendidos a la resolución de un tema determinado.</li> <li>• Identificación, organización, planificación y presentación de las etapas del proceso de modelización y de los resultados relevantes.</li> <li>• Interpretar y correlacionar la estructura de los sistemas materiales y sus propiedades.</li> <li>• Conocer los límites de aplicabilidad en términos de escala de tiempo y de espacio, así como de los resultados obtenidos mediante las diferentes técnicas de modelización en la multiescala.</li> <li>• Defensa sólida de los puntos de vista personales apoyándose en conocimientos científicos bien fundados en las aproximaciones y en los métodos de cálculo utilizados.</li> <li>• Destreza en la elaboración de informes científicos complejos, bien estructurados y bien redactados así como en la presentación oral del trabajo, utilizando los medios habituales.</li> <li>• Preparación para desarrollar una actividad investigadora.</li> </ul>		
5.5.1.3 CONTENIDOS		
<ul style="list-style-type: none"> <li>• El Trabajo de Fin de Máster consiste en la realización de un trabajo autónomo, original e individual que se presenta y defiende ante un tribunal universitario.</li> <li>• Este trabajo debe permitir al estudiante utilizar de manera integrada los contenidos formativos y aplicar las competencias adquiridas en el título de máster que se propone en un ámbito de la investigación que implique la modelización de un sistema, un proceso o una propiedad en una escala de espacio y de tiempo apropiadas.</li> <li>• El estudiante se integrará en un grupo de investigación de una universidad o centro público de investigación donde realizará un proyecto de investigación bajo la dirección de un tutor, que podrá ser uno de los profesores implicados en el máster. Para el desarrollo de este proyecto de investigación, en una primera etapa el estudiante deberá realizar una búsqueda de la bibliografía relevante, discutir los objetivos con el tutor y desarrollar un modelo/programa para resolver el problema propuesto que se llevará a cabo durante el segundo semestre del curso. La discusión de los resultados obtenidos y las conclusiones del estudio realizado deberán recogerse en una memoria que se presentará defenderá en público a final de curso.</li> <li>• Se puede realizar parcial o totalmente tutorizado en centro de investigación o en una empresa o, bajo la supervisión de un tutor en la centro/empresa y un tutor en la Universidad.</li> </ul>		
5.5.1.4 OBSERVACIONES		

La Universitat de Barcelona ha desarrollado una normativa marco para regular la realización del trabajo final de máster que se puede consultar en el siguiente enlace:

<http://www.ub.edu/agenciaqualitat/normativaespecifica/docs/tfm.pdf>

Dicha normativa establece que cada centro debe elaborar y aprobar una normativa propia que desarrolle esta normativa marco. La correspondiente a la Facultat de Química se puede consultar en:

[http://www.ub.edu/quimica/secretaria/docs/TFM\\_normativa\\_FQ.pdf](http://www.ub.edu/quimica/secretaria/docs/TFM_normativa_FQ.pdf)

Esta normativa establece los objetivos, la organización, la matrícula y periodos de evaluación y los procedimientos de archivo y depósito. En el apartado de organización se indica que la Comisión Coordinadora del máster será la responsable de elaborar y revisar el Plan Docente de la asignatura, de elaborar y revisar las normas de presentación formal de los TFM, y de organizar la propuesta, la asignación, el sistema de tutoría y la forma de evaluación.

La normativa de la Facultad de Química establece asimismo que el trabajo Fin de Máster ha de realizarse bajo la supervisión de un/a tutor/a que ha de ser profesor doctor de uno de los departamentos con docencia asignada en el Máster o de los centros colaboradores. Sus funciones son:

- Orientar el trabajo del alumno durante el periodo de realización
- Presentar un informe normalizado valorando la labor realizada por el alumno en el que se hace constar expresamente su autorización a la defensa.
- Participar en la calificación de los Trabajos Fin de Máster en la proporción fijada por el plan docente.

La evaluación del Trabajo se realizará por una comisión de tres profesores del centro, diferentes del profesor tutor, y designados por la Comisión Coordinadora del Máster. La comisión de evaluación valorará a través de la memoria escrita y la presentación y defensa oral si el alumno ha adquirido las competencias propias del título, y tendrá presente el informe presentado por el tutor o tutores.

#### 5.5.1.5 COMPETENCIAS

##### 5.5.1.5.1 BÁSICAS Y GENERALES

CG1 - Saber evaluar y seleccionar la teoría científica adecuada y la metodología precisa de sus campos de estudio para formular juicios a partir de información incompleta o limitada incluyendo, cuando sea preciso y pertinente, una reflexión sobre la responsabilidad social o ética ligada a la solución que se proponga en cada caso.

CG2 - Ser capaz de consultar la bibliografía científica, bases de datos y analizar documentos científico-técnicos en inglés.

CG3 - Ser capaz de elaborar informes, presentaciones y publicaciones científicas.

CG4 - Ser capaz de concebir y diseñar un proceso de investigación.

CG5 - Ser capaz de predecir y controlar la evolución de situaciones complejas mediante el desarrollo de nuevas e innovadoras metodologías de trabajo adaptadas al ámbito científico/investigador, tecnológico o profesional concreto, en general multidisciplinar, en el que se desarrolle su actividad.

CG6 - Desarrollar la autonomía suficiente para participar en proyectos de investigación y colaboraciones científicas o tecnológicas dentro su ámbito temático, en contextos interdisciplinares y, en su caso, con una alta componente de transferencia del conocimiento.

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

CB8 - Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios

CB9 - Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades

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.

##### 5.5.1.5.2 TRANSVERSALES

CT1 - Ser autónomo, dinámico y organizado, con capacidad analítica y de síntesis, con capacidad de análisis crítico y con capacidad de prospectiva.

CT2 - Tener capacidad de autoevaluación y capacidad autocrítica constructiva.

CT3 - Ser capaz de trabajar en equipo y de adaptarse a equipos multidisciplinares e internacionales a diferentes escalas.

CT4 - Tener capacidad de análisis, de síntesis, de adquirir perspectivas globales y de aplicación de los conocimientos a casos prácticos.

CT5 - Tener la capacidad de tomar decisiones y de adaptación a situaciones nuevas.

##### 5.5.1.5.3 ESPECÍFICAS

CE1 - Ser capaz de trabajar en los entornos informáticos que se emplean en los ámbitos de la modelización atomística y multiescala.		
CE2 - Comprender y saber utilizar las estructuras algorítmicas básicas en el contexto de lenguajes de programación de alto nivel.		
CE6 - Comprender las distintas escalas de tiempo y longitud en la Naturaleza y los formalismos físico-matemáticos que se aplican en cada una de ellas.		
CE13 - Dado un material, fenómeno físico o químico o sistema complejo que se quiera modelizar, ser capaz de evaluar y seleccionar las escalas de tiempo y longitud en las que dicho fenómeno tiene lugar.		
CE14 - Dado un material, fenómeno físico o químico o sistema complejo que se quiera modelizar, ser capaz de evaluar y seleccionar cuáles son las mejores técnicas de modelización o simulación para describirlo en función de su escala espacio-temporal.		
CE15 - Comprender los límites computacionales de aplicación de cada metodología estudiada y ser capaz de discernir para cada caso real de estudio qué aproximación es la más apropiada.		
<b>5.5.1.6 ACTIVIDADES FORMATIVAS</b>		
<b>ACTIVIDAD FORMATIVA</b>	<b>HORAS</b>	<b>PRESENCIALIDAD</b>
Trabajo tutelado (presencialidad: 20%)	50	20
Trabajo autónomo (presencialidad: 0%)	400	0
<b>5.5.1.7 METODOLOGÍAS DOCENTES</b>		
Trabajo escrito: Actividad consistente en la presentación de un documento escrito.		
Aprendizaje basado en problemas: Se utiliza el aprendizaje basado en problemas como método de promover el aprendizaje a partir de problemas seleccionados de la vida real. Es necesario que cada alumno identifique y analice el problema, formule interrogantes para convertirlos en objetivos de aprendizaje, busque información para darle respuesta e interaccione, socializando así este conocimiento. Este tipo de metodología permite adquirir conocimientos conceptuales y desarrollar habilidades y actitudes de manera que se convierte en una estrategia especialmente interesante para alcanzar competencias.		
Resolución de problemas: En la actividad de resolución de problemas, el profesorado presenta una cuestión compleja que el alumnado debe resolver, ya sea trabajando individualmente, o en equipo.		
Búsqueda de información: La búsqueda de información, organizada como búsqueda de información de manera activa por parte del alumnado, permite la adquisición de conocimientos de forma directa pero también la adquisición de habilidades y actitudes relacionadas con la obtención de información.		
<b>5.5.1.8 SISTEMAS DE EVALUACIÓN</b>		
<b>SISTEMA DE EVALUACIÓN</b>	<b>PONDERACIÓN MÍNIMA</b>	<b>PONDERACIÓN MÁXIMA</b>
Pruebas orales: entrevistas o exámenes, puestas en común, exposiciones, ...	30.0	70.0
Trabajos realizados por el estudiante: memorias, dossieres, proyectos, carpeta de aprendizaje, ...	30.0	70.0

## 6. PERSONAL ACADÉMICO

6.1 PROFESORADO Y OTROS RECURSOS HUMANOS				
Universidad	Categoría	Total %	Doctores %	Horas %
Universidad Politécnica de Catalunya	Profesor Agregado	5.9	100	5,9
Universidad Politécnica de Catalunya	Profesor Titular de Universidad	11.8	100	11,8
Universidad Politécnica de Catalunya	Catedrático de Universidad	2.9	100	2,9
Universidad de Barcelona	Profesor Agregado	23.5	100	23,5
Universidad de Barcelona	Catedrático de Universidad	26.5	100	26,5
Otros Centros de Nivel Universitario	Otro personal funcionario	8.8	100	8,8
Universidad de Barcelona	Profesor Titular de Universidad	11.8	100	11,8
Universidad de Barcelona	Otro personal docente con contrato laboral	8.8	100	8,8
PERSONAL ACADÉMICO				
Ver Apartado 6: Anexo 1.				
6.2 OTROS RECURSOS HUMANOS				
Ver Apartado 6: Anexo 2.				

## 7. RECURSOS MATERIALES Y SERVICIOS

Justificación de que los medios materiales disponibles son adecuados: Ver Apartado 7: Anexo 1.

## 8. RESULTADOS PREVISTOS

8.1 ESTIMACIÓN DE VALORES CUANTITATIVOS		
TASA DE GRADUACIÓN %	TASA DE ABANDONO %	TASA DE EFICIENCIA %
85	5	90
CODIGO	TASA	VALOR %
No existen datos		
Justificación de los Indicadores Propuestos:		
Ver Apartado 8: Anexo 1.		
8.2 PROCEDIMIENTO GENERAL PARA VALORAR EL PROCESO Y LOS RESULTADOS		
<p><b>TEXTO GENERAL DE APLICACIÓN A TODOS LOS MÁSTERES DE LA UNIVERSITAT DE BARCELONA</b></p> <p>La UB dentro del marco del sistema interno de aseguramiento de la garantía de calidad de las titulaciones, tal como se indica en el punto 9, tiene establecido en su programa AUDIT-UB el proceso de análisis y evaluación de los resultados de aprendizaje a través de tres acciones generales:</p> <p>a) Resultados de aprendizaje.</p> <p>La Agencia para la Calidad de la UB, se encarga de recoger toda la información para facilitar el proceso del análisis de los datos sobre los resultados obtenidos en cada centro respecto a sus diferentes titulaciones. Anualmente se envían al decano/director, como mínimo los datos sobre rendimiento académico, abandono, graduación y eficiencia para que las haga llegar a los jefes de estudios/coordinadores correspondientes para su posterior análisis.</p> <p>También en el momento de diseñar un nuevo plan de estudios, el centro hace una estimación de todos los datos históricos que tiene, justificando dicha estimación a partir del perfil de ingreso recomendado, el tipo de estudiantes que acceden, los objetivos planteados, el grado de dedicación de los estudiantes en la carrera y otros elementos de contexto que consideren apropiados. Estas estimaciones se envían a la Agencia para la Calidad de la UB.</p> <p>Anualmente, la Comisión de Máster hará un seguimiento para valorar el progreso y los resultados de aprendizaje de los estudiantes. También revisará las estimaciones de los indicadores de rendimiento académico, tasa de abandono y de graduación y definirá las acciones derivadas del seguimiento que se remiten al decanato/dirección del centro.</p>		

b) Resultados de satisfacción de los diferentes miembros de la comunidad universitaria del centro.

La Agencia para la Calidad de la UB, remite al decano/director, coordinadores de máster y directores de departamento los resultados de la encuesta de opinión de los estudiantes sobre la acción docente del profesorado.

Los directores de departamento informarán de los resultados en el consejo de departamento.

Los coordinadores de máster solicitarán a los jefes de departamento que elaboren un informe sobre la acción docente del profesorado, como también, las acciones que se llevarán a cabo para mejorarla.

El coordinador de máster, con los resultados de la encuesta de opinión de los estudiantes sobre la acción docente del profesorado, y los informes elaborados por los directores de departamento elaborará un documento de síntesis que presentará a la comisión de coordinación de máster para analizarlo.

La administración del centro gestionará las encuestas de satisfacción de los usuarios respecto a los recursos y servicios del centro y elaborará un informe de los resultados de satisfacción de los usuarios respecto a los recursos y servicios del centro junto con la propuesta de mejora. El informe se debatirá en la Junta de centro.

c) Resultados de la inserción laboral.

Tal y como se ha venido haciendo con las titulaciones de grado y doctorado, se pretende llevar a cabo los estudios de inserción laboral de los titulados de máster.

AQU Catalunya en colaboración con los Consejos Sociales de las siete universidades públicas catalanas, gestiona, de momento, las encuestas de inserción laboral de los titulados de Licenciados, diplomados, Ingenieros y las de los de Doctorado; pero no las de máster.

En este caso concreto de los estudios de Máster y hasta que no haya el acuerdo entre las Universidades públicas y AQU, será la Agencia de Calidad de la Universidad la que va a realizar este proceso.

Una vez realizada la encuesta, la Agencia de Calidad de la Universidad de Barcelona remitirá los ficheros al decano/director del centro.

El decanato/dirección del centro analizará los datos y elaborará un informe ¿resumen¿ para conocer las vías por las que se hace la transición de los titulados al mundo laboral y para conocer el grado de satisfacción de los graduados con la formación recibida en la universidad (esta encuesta de satisfacción de la formación recibida se realiza una vez el titulado solicita su título). Dicho informe se debatirá en el Centro, a nivel de la comisión correspondiente.

Por otra parte y dada la importancia que tiene en los estudios de máster el Trabajo Fin de Máster, anualmente la Comisión de Máster debe analizar su desarrollo y debe informar al Centro para incluirlo en la memoria de seguimiento.

d) Resultados de satisfacción de los diferentes miembros de la comunidad universitaria del centro

La Agencia para la Calidad de la UB, remite al decano/director, coordinadores de y directores de departamento los resultados de la encuesta de opinión de los estudiantes sobre la acción docente del profesorado.

Los directores de departamento informan de los resultados en el consejo de departamento. Los coordinadores de máster solicitan a los jefes de departamento que elaboren un informe sobre la acción docente del profesorado, como también, las acciones que se llevarán a cabo para mejorarla.

## 9. SISTEMA DE GARANTÍA DE CALIDAD

<b>ENLACE</b>	<a href="http://www.ub.edu/agenciaqualitat/academicodocent/desenvolupament/suport.html">http://www.ub.edu/agenciaqualitat/academicodocent/desenvolupament/suport.html</a>
---------------	---

## 10. CALENDARIO DE IMPLANTACIÓN

<b>10.1 CRONOGRAMA DE IMPLANTACIÓN</b>	
<b>CURSO DE INICIO</b>	2015
Ver Apartado 10: Anexo 1.	
<b>10.2 PROCEDIMIENTO DE ADAPTACIÓN</b>	
El título de máster que se propone es de nueva creación y no supone ningún tipo de adaptación de un título previo.	
<b>10.3 ENSEÑANZAS QUE SE EXTINGUEN</b>	
<b>CÓDIGO</b>	<b>ESTUDIO - CENTRO</b>

## 11. PERSONAS ASOCIADAS A LA SOLICITUD

<b>11.1 RESPONSABLE DEL TÍTULO</b>			
<b>NIF</b>	<b>NOMBRE</b>	<b>PRIMER APELLIDO</b>	<b>SEGUNDO APELLIDO</b>
<b>DOMICILIO</b>	<b>CÓDIGO POSTAL</b>	<b>PROVINCIA</b>	<b>MUNICIPIO</b>
Gran Vía de les Corts Catalanes, 585	08007	Barcelona	Barcelona
<b>EMAIL</b>	<b>MÓVIL</b>	<b>FAX</b>	<b>CARGO</b>

suportmaster@ub.edu		934031155	
<b>11.2 REPRESENTANTE LEGAL</b>			
<b>NIF</b>	<b>NOMBRE</b>	<b>PRIMER APELLIDO</b>	<b>SEGUNDO APELLIDO</b>
<b>DOMICILIO</b>	<b>CÓDIGO POSTAL</b>	<b>PROVINCIA</b>	<b>MUNICIPIO</b>
Gran Via de lesCorts Catalanes, 585	08007	Barcelona	Barcelona
<b>EMAIL</b>	<b>MÓVIL</b>	<b>FAX</b>	<b>CARGO</b>
vr-paiq@ub.edu	934031128	934031155	
El Rector de la Universidad no es el Representante Legal			
Ver Apartado 11: Anexo 1.			
<b>11.3 SOLICITANTE</b>			
El responsable del título es también el solicitante			
<b>NIF</b>	<b>NOMBRE</b>	<b>PRIMER APELLIDO</b>	<b>SEGUNDO APELLIDO</b>
<b>DOMICILIO</b>	<b>CÓDIGO POSTAL</b>	<b>PROVINCIA</b>	<b>MUNICIPIO</b>
Gran Via de les Corts Catalanes, 585	08007	Barcelona	Barcelona
<b>EMAIL</b>	<b>MÓVIL</b>	<b>FAX</b>	<b>CARGO</b>
suportmaster@ub.edu		934031155	

## **Apartado 1: Anexo 1**

**Nombre** :Modelizacion Computacional castellano signat.pdf

**HASH SHA1** :11000899A3C5A0F83FAE959603A745942559C9D1

**Código CSV** :164775947846199069692717

Ver Fichero: Modelizacion Computacional castellano signat.pdf

## **Apartado 2: Anexo 1**

**Nombre** :ALEGACIONES2 y JUSTIFICACIÓN Modelización Computacional.pdf

**HASH SHA1** :123ED1A15483622BD2637967B4B20615534780D9

**Código CSV** :189248075419241710659340

Ver Fichero: ALEGACIONES2 y JUSTIFICACIÓN Modelización Computacional.pdf

#### **Apartado 4: Anexo 1**

Nombre :Sec4.1.pdf

**HASH SHA1** :093C967B21818717E90C8CE2CEF0972860EA91EC

**Código CSV** :175892777320078179624675

Ver Fichero: Sec4.1.pdf

## **Apartado 5: Anexo 1**

Nombre :Sec5.1\_all.pdf

**HASH SHA1** :701D7DCDE30D8E735D2D9FEAFE646C1FBC0D5DEB

**Código CSV** :185612703078817156593856

Ver Fichero: Sec5.1\_all.pdf

## **Apartado 6: Anexo 1**

Nombre :Sec6.1.pdf

HASH SHA1 :78CBB6B3C5D50B2CB9FD5BC09C33FE89D6248248

Código CSV :175893824214441165223743

Ver Fichero: Sec6.1.pdf

## **Apartado 6: Anexo 2**

Nombre :Sec6.2.pdf

HASH SHA1 :C3CAD73D68D7B24476DAE7C8DE59C0D48FB5B745

Código CSV :175894083221220519195082

Ver Fichero: Sec6.2.pdf

## **Apartado 7: Anexo 1**

**Nombre :**Sec7.1-7.2+cartas.pdf

**HASH SHA1 :**F75B3D98C712DF8CE86628B35A9A35781F072EBA

**Código CSV :**175903757713563681551421

**Ver Fichero:** Sec7.1-7.2+cartas.pdf

## **Apartado 8: Anexo 1**

**Nombre :**Sec8.1.pdf

**HASH SHA1 :**AC368113848930FCC019A641167DC2F000818A3E

**Código CSV :**175894282811711552411171

**Ver Fichero:** Sec8.1.pdf

## **Apartado 10: Anexo 1**

**Nombre :**Sec10.1.pdf

**HASH SHA1 :**FD3E197F09B7E59B66DAE32F22E7A83373994DF5

**Código CSV :**175894411005670054323645

**Ver Fichero:** Sec10.1.pdf

## **Apartado 11: Anexo 1**

**Nombre** :DELEGACION RECTOR UB EN VICERRECTOR.pdf

**HASH SHA1** :0518E056325ACF3DD9E12C8C777B5CD63CFBF25B

**Código CSV** :156068971692572397043819

Ver Fichero: DELEGACION RECTOR UB EN VICERRECTOR.pdf

