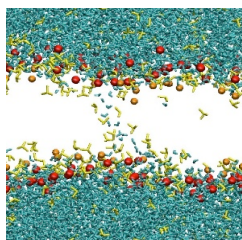


Adreçat a:

Llicenciats o graduats en Física, Química, Bioquímica, Enginyeria Física, Enginyeria de Materials, Enginyeria Química, o equivalents.

Entitats participants (BKC):

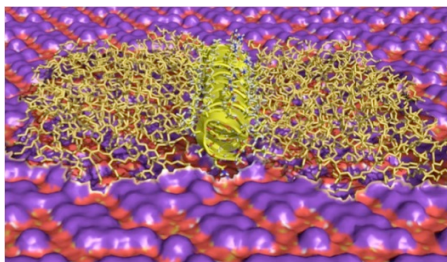
- Facultat Química (UB) (coordinadora)
 - Departament de Ciència de Materials i Química Física
 - Departament de Química Inorgànica i Orgànica
- Facultat de Física (UB)
 - Departament de Física de la Matèria Condensada
- Facultat de Biologia (UB)
 - Departament de Bioquímica i Biomedicina Molecular
- Departament de Física (UPC)
 - Facultat d'Informàtica
 - Escola Politècnica Superior d'Edificació
- Departament d'Enginyeria Química (UPC)
 - Escola Tècnica Superior d'Enginyeria Industrial
 - Escola d'Enginyeria de Barcelona Est
- Institut de Química Avançada de Catalunya (CSIC)
- Institut de Ciència de Materials de Barcelona (CSIC)
- Barcelona Supercomputing Center (BSC)



The dimethylsulfoxide molecule facilitates the formation of electropores in a membrane

Objectius formatius:

- L'objectiu principal és donar als alumnes una visió global d'eines de programació i paquets computacionals per estudiar els problemes relacionats amb la Física, la Química i la Bioquímica, on l'estructura i propietats de la matèria a nivell atòmic i molecular és rellevant.
- Els estudiants adquiriran coneixements per decidir quines tècniques de simulació són les més adequades en funció de la grandària (escala de grandària o mida) del sistema a modelar i depenent del període temporal (escala de temps) en què es produeix el procés.



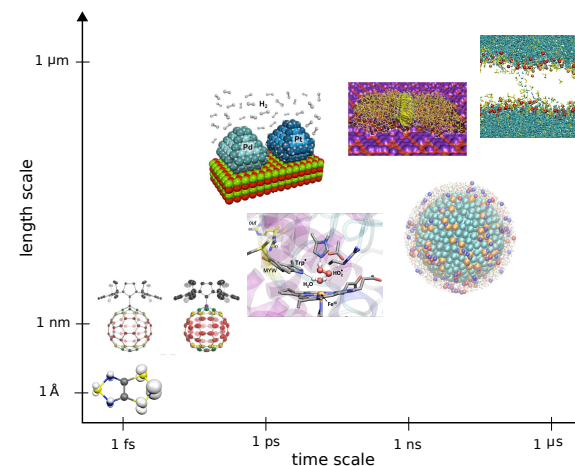
Nanotub derivat de pèptids dendronitzats adsorbit en una superfície de mica.



Màster oficial en

MODELITZACIÓ COMPUTACIONAL ATOMÍSTICA I MULTIESCALA EN FÍSICA, QUÍMICA I BIOQUÍMICA

Atomistic and Multiscale Computational Modelling in Physics, Chemistry and Biochemistry



Multiscale modelling

Estructura del màster

Estructura del màster

60 ECTS

21 ECTS en matèries troncales

21 ECTS en matèries optatives

18 ECTS del treball final de màster (TFM)

Assignatures obligatòries

Elements de Matemàtica Aplicada i Informàtica

Eines informàtiques 3 ECTS

Introducció a la Computació Científica 6 ECTS

Modelització a la Multiescala 6 ECTS

Modelització Molecular 6 ECTS

Assignatures optatives

Mètodes Matemàtics Aplicats 3 ECTS

Eines Informàtiques Avançades 3 ECTS

Mecànica Quàntica

Estructura Electrònica 3 ECTS

Dinàmica Quàntica 3 ECTS

Mecànica Estadística

Fonaments de Mecànica Estadística 3 ECTS

Mecànica Estadística de No Equilibri 3 ECTS

Tècniques de Simulació Avançada

Curs Avançat en Simulació Molecular 3 ECTS

Multiescala, Mètodes *coarse grain* i

Mètodes Mixtes 3 ECTS

Materials

Matèria Condensada 3 ECTS

Estructura Electrònica de Sòlids 3 ECTS

Superfícies i Catàlisi 3 ECTS

Estructura Molecular i

Reactivitat Química 3 ECTS

Soft Matter i Sistemes Complexos

Soft Matter 3 ECTS

Sistemes Complexos 3 ECTS

Bioquímica Computacional 3 ECTS

Biologia de Sistemes Computacional 3 ECTS

Treballs Final de Màster

Metodologia

-Mecànica quàntica/mecànica molecular (QM/MM)

-Mètodes *ab initio*

-Mesures de simetria contínues

-Mètodes Monte Carlo (MC) clàssic i quàntic

-Dinàmica molecular *ab initio*

-Dinàmica molecular i browniana

-Mecànica estadística de no equilibri

-Xarxes complexes

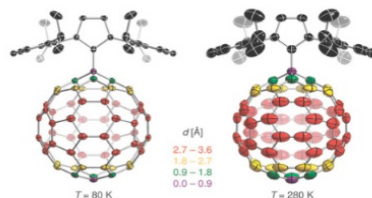
Sistemes quàntics

-Fluids i sòlids quàntics. Gasos de Bose i de Fermi

-Dinàmica quàntica. Reactivitat

-Teoria variacional de l'estat de transició

-Estats electrònics excitats



Rotació d'un ful·lerè en un cristall amfidinàmic.

Soft Matter

-Modelització mesoscòpica

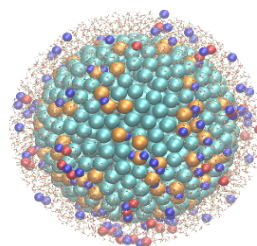
-Fluids complexos. Fluids granulars. Matèria activa

-Nanosistemes i nanodispositius polimèrics

-Col·loides. Polielectròlits. Nanopartícules *soft*

-Complexació macromolecular

Nanopartícula esfèrica carregada en dissolució.



Treballs Final de Màster

Materials

-Matèria condensada

-Líquids i dissolucions moleculars

-Magnetisme molecular

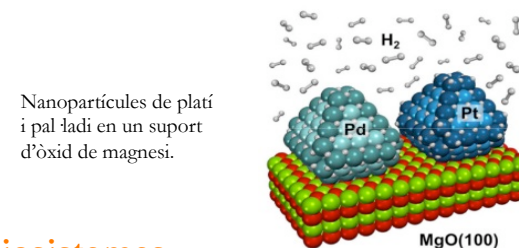
-Transicions de fase, estructural i magnètica

-Biestabilitat. Metastabilitat. Histèresi

-Deformacions irreversibles a la nanoescala

-Química de superfícies. Catàlisi

-Nanopartícules, nanoclústers i nanocristalls



Nanopartícules de platí i pal·ladi en un suport d'òxid de magnesi.

Biosistemes

-Simulació QM/MM i MC de processos bioquímics complexos

-Enginyeria de proteïnes

-Interaccions lligand-proteïna. *Binding*

-Disseny de fàrmacs

-Processos en membranes cel·lulars

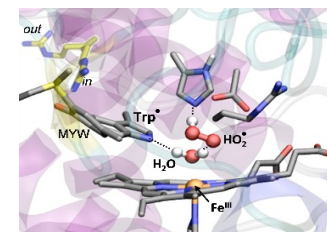
-Transducció de senyals a nivell cel·lular

-Ordre espacio-temporal sota fluctuacions

-Processos de difusió-reacció en medis intracel·lulars

-Catàlisi enzimàtica

-*Crowding* macromolecular



Intermedi d'una reacció enzimàtica en una catalasa-peroxidasa.