

Simulació de Sistemes Nanomètrics

2014/2015

Codi: 103304

Crèdits: 6

Titulació	Tipus	Curs	Semestre
2501922 Nanociència i Nanotecnologia	OT	0	0

Professor de contacte

Nom: Xavier Cartoixa Soler

Correu electrònic: Xavier.Cartoixa@uab.cat

Utilització de llengües

Llengua vehicular majoritària: espanyol (spa)

Grup íntegre en anglès: No

Grup íntegre en català: No

Grup íntegre en espanyol: No

Equip docent

José Miguel Alonso Pruneda

Jordi Faraudo Gener

Riccardo Rurali

Prerequisits

Es recomendable tener buenos conocimientos de Mecánica Cuántica y Física del Estado Sólido.

Conocimientos básicos de UNIX y fundamentos de programación (FORTRAN/C/C++) son deseables.

Objectius

Alcanzar una visión global de los métodos de cálculo en sistemas nanométricos, y las posibilidades y limitaciones de cada técnica. Entender los principios fundamentales del cálculo de estructura electrónica y de los algoritmos de dinámica molecular. Introducir las bases de la programación, y conocer la estructura general de los códigos de simulación en lenguajes de programación científica más frecuentes. Aplicar estos métodos computacionales al estudio de sistemas bio-nano-tecnológicos. Desarrollar habilidades básicas para el desarrollo de un proyecto de investigación en equipo, y exposición pública de las conclusiones del estudio.

Competències

- Adaptar-se a noves situacions.
- Aplicar els conceptes, principis, teories i fets fonamentals relacionats amb la nanociència i la nanotecnologia a la resolució de problemes de natura quantitativa o qualitativa en l'àmbit de la nanociència i la nanotecnologia.
- Aprendre de manera autònoma.
- Comunicar-se amb claredat en anglès.
- Comunicar-se oralment i per escrit en la llengua pròpia.
- Demostrar motivació per la qualitat.
- Demostrar que es comprenen els conceptes, principis, teories i fets fonamentals relacionats amb la nanociència i la nanotecnologia.

- Gestionar l'organització i la planificació de tasques.
- Interpretar les dades obtingudes mitjançant mesures experimentals, incloent-hi l'ús d'eines informàtiques, identificar-ne el significat i relacionar-les amb les teories químiques, físiques o biològiques apropiades.
- Liderar i coordinar grups de treball.
- Obtindre, gestionar, analitzar, sintetitzar i presentar informació, incluent-hi la utilització de mitjans telemàtics i informàtics.
- Operar amb un cert grau d'autonomia.
- Proposar idees i solucions creatives.
- Raonar de forma crítica.
- Reconèixer els termes relatius als àmbits de la física, la química, la biologia, la nanociència i la nanotecnologia en llengua anglesa i fer servir l'anglès de manera eficaç per escrit i oralment en l'àmbit laboral.
- Reconèixer i analitzar problemes físics, químics i biològics en l'àmbit de la nanociència i la nanotecnologia i plantejar respostes o treballs adequats per a la seva resolució, incloent-hi en els casos necessaris l'ús de fonts bibliogràfiques.
- Resoldre problemes i prendre decisions.
- Treballar en equip i cuidar les relacions interpersonals de treball.

Resultats d'aprenentatge

1. Adaptar-se a noves situacions.
2. Analitzar correctament les bases de dades mitjançant paquets estadístics.
3. Aplicar els conceptes de la programació estructurada i orientada a objectes al desenvolupament de programes per a la simulació i computació de propietats en la nanoescala.
4. Aplicar els continguts teòrics adquirits a l'explicació de fenòmens experimentals.
5. Aplicar tècniques Monte Carlo a la resolució de problemes en nanotecnologia.
6. Aprendre de manera autònoma.
7. Avaluar els resultats experimentals de manera crítica i deduir-ne el significat.
8. Comprendre textos i bibliografia en anglès sobre cadascuna de les tècniques, metodologies, eines i instruments de la matèria.
9. Comunicar-se amb claredat en anglès.
10. Comunicar-se oralment i per escrit en la llengua pròpia.
11. Demostrar motivació per la qualitat.
12. Exposar informes breus sobre la matèria en anglès.
13. Fer cerques bibliogràfiques de documentació científica.
14. Gestionar l'organització i la planificació de tasques.
15. Identificar els diferents paradigmes de simulació en la nanoescala (primers principis, mètodes semiempírics, mètodes de continu, dinàmica molecular).
16. Identificar les situacions en les quals les diferents metodologies estudiades poden ajudar a resoldre situacions problemàtiques i saber seleccionar la tècnica més òptima.
17. Interpretar discrepàncies entre resultats teòrics i pràctics (incloent simulació) trobats a les mesures.
18. Interpretar les capacitats d'un programa de simulació en funció dels termes que el model incorpora i dels efectes que se'n deriven.
19. Liderar i coordinar grups de treball.
20. Obtindre, gestionar, analitzar, sintetitzar i presentar informació, incluent-hi la utilització de mitjans telemàtics i informàtics.
21. Operar amb un cert grau d'autonomia.
22. Proposar idees i solucions creatives.
23. Raonar de forma crítica.
24. Reconèixer el rang d'aplicabilitat, tant respecte a mides del sistema com als tipus de propietats computables, d'aquests paradigmes de simulació.
25. Reconèixer els termes propis de cadascun dels tòpics de la matèria Metodologies i experimentació en nanociència i nanotecnologia.
26. Redactar informes sobre la matèria en anglès.
27. Resoldre problemes amb l'ajuda de bibliografia complementària proporcionada.
28. Resoldre problemes i prendre decisions.
29. Treballar en equip i cuidar les relacions interpersonals de treball.

30. Utilitzar adequadament els reposadors i llibreries de mètodes numèrics per a la resolució dels problemes d'àlgebra lineal que apareixen en la simulació de sistemes nanomètrics.
31. Utilitzar programes per a càlculs de primers principis i de dinàmica molecular.

Continguts

Métodos de estructura electrónica en la nano-escala (9 horas)

Introducción a la simulación de nanosistemas. El problema de la estructura electrónica: la aproximación Hartree-Fock y las correlaciones electrónicas. Fundamentos de la Teoría del Funcional de la Densidad. Las ecuaciones de Kohn-Sham. La aproximación del pseudopotencial. Representaciones de las funciones de onda electrónica. Métodos semi-empíricos: Tight-Binding. Predicciones de propiedades de materiales.

Potenciales interatómicos e intermoleculares (6 horas)

Potenciales interatómicos para líquidos. Potenciales interatómicos para semiconductores. Potenciales interatómicos para metales. Campos de Fuerzas para Biomoléculas y optimización de estructuras biomoleculares.

Algoritmos de simulación (10 horas)

Fundamentos de mecánica estadística. El método Monte-Carlo. Fundamentos de Dinámica Molecular. Dinámica molecular microcanónica. Dinámica molecular a presión y temperatura constante. Aplicaciones de la dinámica molecular a biomoléculas y sistemas bio-nano-tecnológicos.

Introducción a la programación (7 horas)

Fundamentos de programación (Fortran vs C++). Estructura modular de los programas. Utilización de variables, funciones y subrutinas. Uso de librerías. Introducción a algoritmos básicos. Condiciones de contorno.

Estructura de un programa Tight-Binding: Construcción del Hamiltoniano, diagonalización y autoconsistencia.

Estructura de un programa sencillo de dinámica molecular: búsqueda de vecinos, cálculo de energía total y fuerzas, ecuaciones del movimiento.

Prácticas de laboratorio (20 horas)

Prácticas guiadas en ordenador sobre los diferentes aspectos expuestos en las clases magistrales.

Metodologia

La formación se basará en clases magistrales, problemas de aula, y prácticas en laboratorio de computación. El alumno también deberá resolver problemas individuales que serán evaluados, y desarrollar un pequeño proyecto de investigación en grupo, que se expondrá públicamente en clase.

Activitats formatives

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Tipus: Dirigides			
Clases Magistrales	25	1	1, 5, 6, 8, 9, 10, 11, 13, 15, 16, 17, 18, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28
Prácticas de Aula	7	0,28	1, 2, 3, 6, 8, 10, 11, 13, 14, 16, 20, 21, 22, 23, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31

Prácticas de laboratorio	20	0,8	1, 2, 3, 4, 6, 7, 8, 10, 11, 13, 14, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31
Tipus: Autònomes			
Estudio y resolución de problemas	33	1,32	6, 8, 21, 23, 25, 28
Trabajo práctico	25	1	7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 19, 20, 22, 26, 28, 29

Avaluació

Las prácticas son obligatorias. Evaluación continua mediante problemas (20%), prácticas de laboratorio e informes de las mismas (40%). Se plantearán pequeños proyectos que serán expuestos en inglés en clase (40%).

Activitats d'avaluació

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Problemas independientes	20%	10	0,4	6, 8, 10, 11, 13, 17, 21, 22, 23, 27, 28
Proyecto práctico	40%	20	0,8	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 9, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 27, 28, 29, 30, 31
Prácticas de laboratorio	40%	10	0,4	2, 3, 4, 7, 8, 10, 14, 16, 17, 21, 22, 26, 27, 28, 29, 30, 31

Bibliografia

"Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods", R. M. Martin, Cambridge Univ. Press. 2004.

"The Art of Molecular Dynamics Simulation", D. C. Rapaport, Cambridge Univ. Press. 1995.

"Computer Simulations of Liquids", M. P. Allen & D. J. Tildesley, Oxford Univ. Press. 1989.