

## Simulación de Sistemas Nanométricos

Código: 103304  
Créditos ECTS: 6

Titulación	Tipo	Curso	Semestre
2501922 Nanociencia y Nanotecnología	OT	4	0

### Contacto

Nombre: Jose Miguel Alonso Pruneda

Correo electrónico: JoseMiguel.Alonso@uab.cat

### Uso de idiomas

Lengua vehicular mayoritaria: español (spa)

Algún grupo íntegramente en inglés: No

Algún grupo íntegramente en catalán: No

Algún grupo íntegramente en español: No

### Equipo docente

Jordi Faraudo Gener

### Prerequisitos

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

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

### Objetivos y contextualización

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.

### Competencias

- Adaptarse a nuevas situaciones.
- Aplicar los conceptos, principios, teorías y hechos fundamentales relacionados con la Nanociencia y Nanotecnología a la resolución de problemas de naturaleza cuantitativa o cualitativa en el ámbito de la Nanociencia y Nanotecnología.
- Aprender de forma autónoma.
- Comunicarse con claridad en inglés.
- Comunicarse de forma oral y escrita en la lengua nativa.
- Demostrar motivación por la calidad.
- Demostrar que comprende los conceptos, principios, teorías y hechos fundamentales relacionados con la Nanociencia y Nanotecnología.
- Gestionar la organización y planificación de tareas.

- Interpretar los datos obtenidos mediante medidas experimentales, incluyendo el uso de herramientas informáticas, identificar su significado y relacionarlos con las teorías químicas, físicas o biológicas apropiada.
- Liderar y coordinar grupos de trabajo.
- Obtener, gestionar, analizar, sintetizar y presentar información, incluyendo la utilización de medios telemáticos e informáticos.
- Operar con un cierto grado de autonomía e integrarse en poco tiempo en el ambiente de trabajo
- Proponer ideas y soluciones creativas.
- Razonar de forma crítica.
- Reconocer los términos relativos al ámbito de la Física, Química y Biología, así como a la Nanociencia y la Nanotecnología en lengua inglesa y utilizar eficazmente el inglés en forma escrita y oral en su ámbito laboral.
- Reconocer y analizar problemas físicos, químicos y biológicos en el ámbito de la Nanociencia y Nanotecnología, plantear respuestas o trabajos adecuados para su resolución, incluyendo en casos necesarios el uso de fuentes bibliográficas.
- Resolver problemas y tomar decisiones.
- Trabajar en equipo y cuidar las relaciones interpersonales de trabajo.

## **Resultados de aprendizaje**

1. Adaptarse a nuevas situaciones.
2. Analizar correctamente las bases de datos mediante paquetes estadísticos.
3. Aplicar los conceptos de la programación estructurada y orientada a objetos al desarrollo de programas para la simulación y computación de propiedades en la nanoscalá.
4. Aplicar los contenidos teóricos adquiridos a la explicación de fenómenos experimentales.
5. Aplicar técnicas Monte Carlo a la resolución de problemas en nanotecnología.
6. Aprender de forma autónoma.
7. Comprender textos y bibliografía en inglés sobre cada una de las técnicas, metodologías, herramientas e instrumentos de la materia.
8. Comunicarse con claridad en inglés.
9. Comunicarse de forma oral y escrita en la lengua nativa.
10. Demostrar motivación por la calidad.
11. Evaluar resultados experimentales de forma crítica y deducir su significado.
12. Exponer breves informes sobre la materia en inglés.
13. Gestionar la organización y planificación de tareas.
14. Identificar las situaciones en las que las distintas metodologías estudiadas pueden ayudar a resolver situaciones problemáticas y saber seleccionar la técnica más óptima.
15. Identificar los distintos paradigmas de simulación en la nanoscalá (primeros principios, métodos semiempíricos, métodos de continuo, dinámica molecular).
16. Interpretar discrepancias entre resultados teóricos y prácticos (incluyendo simulación) encontrados en las mediciones.
17. Interpretar las capacidades de un programa de simulación en función de los términos que el modelo incorpora y de los efectos que de ellos se derivan.
18. Liderar y coordinar grupos de trabajo.
19. Obtener, gestionar, analizar, sintetizar y presentar información, incluyendo el uso de medios telemáticos e informáticos.
20. Operar con un cierto grado de autonomía e integrarse en poco tiempo en el ambiente de trabajo
21. Proponer ideas y soluciones creativas.
22. Razonar de forma crítica.
23. Realizar búsquedas bibliográficas de documentación científica.
24. Reconocer el rango de aplicabilidad, tanto en lo que respecta a tamaños del sistema como a los tipos de propiedades computables, de estos paradigmas de simulación.
25. Reconocer los términos propios de cada uno de los tópicos de la materia Metodologías y experimentación en Nanociencia y Nanotecnología.
26. Redactar informes sobre la materia en inglés.
27. Resolver problemas con la ayuda de bibliografía complementaria proporcionada.
28. Resolver problemas y tomar decisiones.
29. Trabajar en equipo y cuidar las relaciones interpersonales de trabajo.

30. Utilizar adecuadamente los repositorios y librerías de métodos numéricos para la resolución de los problemas de álgebra lineal que aparecen en la simulación de sistemas nanométricos.
31. Utilizar programas para cálculos de primeros principios y de dinámica molecular.

## Contenido

Introducción a la programación (7 horas)

Fundamentos de programación (Fortran / python). 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.

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.

Simulación atomística de sistemas namétricos en equilibrio y fuera del equilibrio (16 horas)

Fundamentos del método de MonteCarlo y ejemplos. Modelización atomística: métodos de visualización formatos de datos, bases de datos. Modelización atomística: fundamentos del método de Dinámica Molecular. Dinámica Molecular Ab Initio. Dinámica Molecular con campos de fuerzas. Ejemplos de aplicación a simulación de sistemas nanométricos. Simulación de colectividades termodinámicas: termostatos y barostatos. Ejemplos prácticos de aplicación a sistemas bio-nano. Uso de estructuras de bases de datos de biología estructural para simulaciones de dinámica molecular. Dinámica molecular fuera de equilibrio: fuerzas y campos externos, gradientes térmicos.

Prácticas de laboratorio (20 horas)

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

## Metodología

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.

## Actividades

Título	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
<b>Tipo: Dirigidas</b>			
Clases Magistrales	25	1	1, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 23, 15, 14, 16, 17, 19, 20, 21, 22, 24, 25, 26, 27, 28
Prácticas de Aula	7	0,28	1, 2, 3, 6, 7, 9, 10, 23, 13, 14, 19, 20, 21, 22, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31
Prácticas de laboratorio	20	0,8	1, 2, 3, 4, 6, 11, 7, 9, 10, 23, 13, 14, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31
<b>Tipo: Autónomas</b>			
Estudio y resolución de	33	1,32	6, 7, 20, 22, 25, 28

problemas

---

Trabajo práctico	25	1	11, 7, 8, 9, 10, 12, 23, 13, 18, 19, 21, 26, 28, 29
------------------	----	---	---

---

## Evaluación

Las prácticas son obligatorias. Evaluación continua mediante presentación de problemas (15%), prácticas de laboratorio e informes de las mismas (40%). Se plantearán pequeños proyectos individuales que serán expuestos (preferiblemente en inglés) como parte de la evaluación final (45%).

## Actividades de evaluación

Título	Peso	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
Informe prácticas de laboratorio	40%	10	0,4	2, 3, 4, 11, 7, 9, 13, 14, 16, 20, 21, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31
Problemas independientes	15%	10	0,4	6, 7, 9, 10, 23, 16, 20, 21, 22, 27, 28
Proyecto práctico final	45%	20	0,8	1, 2, 3, 4, 5, 6, 11, 8, 10, 12, 23, 13, 15, 14, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 24, 25, 27, 28, 29, 30, 31

## Bibliografía

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

"Molecular Modelling Basics", Jan H. Hensen, CRC Press, 2010

"Understanding Molecular Simulation", Daan Frenkel y Berend Smit, Academic Press, 2n edition 202

"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.