

**Tècniques de Simulació**

Codi: 43440  
Crèdits: 6

Titulació	Tipus	Curs	Semestre
4314939 Nanociència i Nanotecnologia Avançades / Advanced Nanoscience and Nanotechnology	OT	0	1

**Professor/a de contacte**

Nom: Xavier Cartoixa Soler

Correu electrònic: Xavier.Cartoixa@uab.cat

**Equip docent**

Francesc Torres Canals

Laura Masgrau Fontanet

Xavier Solans Monfort

**Utilització d'idiomes a l'assignatura**

Llengua vehicular majoritària: anglès (eng)

**Prerequisits**

Caldran nocions bàsiques de mecànica quàntica per la part del curs d'ab initio.

**Objectius**

Introducció a l'ús de software pel càlcul de propietats físiques i químiques a la nanoescala, i perspectiva dels formalismes subjacents.

**Competències**

- Buscar informació en la literatura científica fent servir els canals apropiats i integrar aquesta informació per plantejar i contextualitzar un tema de recerca.
- Dominar la terminologia científica i desenvolupar l'habilitat d'argumentar els resultats de la recerca en el context de la producció científica, per comprendre i interactuar eficaçment amb altres professionals.
- Identificar les tècniques de caracterització i anàlisi pròpies de la nanotecnologia i conèixer-ne els fonaments, dins de l'especialitat pròpia.
- Que els estudiants sàpiguin aplicar els coneixements adquirits i la seva capacitat de resolució de problemes en entorns nous o poc coneguts dins de contextos més amplis (o multidisciplinaris) relacionats amb la seva àrea d'estudi.
- Que els estudiants sàpiguin comunicar les seves conclusions, així com els coneixements i les raons últimes que les fonamenten, a públics especialitzats i no especialitzats d'una manera clara i sense ambigüitats
- Que els estudiants tinguin les habilitats d'aprenentatge que els permetin continuar estudiant, en gran manera, amb treball autònom a autodirigit

**Resultats d'aprenentatge**

1. Analitzar la complexitat subjacent i els límits computacionals dels diferents mètodes de resolució de les equacions descriptives del model.
2. Buscar informació en la literatura científica fent servir els canals apropiats i integrar aquesta informació per plantejar i contextualitzar un tema de recerca.
3. Dominar la terminologia científica i desenvolupar l'habilitat d'argumentar els resultats de la recerca en el context de la producció científica, per comprendre i interactuar eficaçment amb altres professionals.
4. Identificar la tècnica computacional més adequada per al problema abordat
5. Identificar les equacions que regeixen la dinàmica molecular newtoniana, el transport electrònic de primers principis i la dinàmica d'estructures.
6. Interpretar les capacitats d'una tècnica de simulació i les limitacions fonamentals en funció dels termes que el model incorpora.
7. Que els estudiants sàpigui aplicar els coneixements adquirits i la seva capacitat de resolució de problemes en entorns nous o poc coneguts dins de contextos més amplis (o multidisciplinaris) relacionats amb la seva àrea d'estudi.
8. Que els estudiants sàpigui comunicar les seves conclusions, així com els coneixements i les raons últimes que les fonamenten, a públics especialitzats i no especialitzats d'una manera clara i sense ambigüitats
9. Que els estudiants tinguin les habilitats d'aprenentatge que els permetin continuar estudiant, en gran manera, amb treball autònom a autodirigit
10. Utilitzar autònomament eines de simulació per comprendre millor situacions experimentals.
11. Utilitzar de manera eficient tècniques computacionals per estudiar problemes científics relatius als materials i a la nanoescala.

## Continguts

- Breu introducció a Linux.
- Mètodes ab-initio pel transport electrònic: teoria de funcional densitat (DFT), equacions de Kohn-Sham, ones planes i orbitals quasi-atòmics. Fonaments del transport balístic. Funcions de Green fora del equilibri. Obtenció de coeficients de transmissió amb TRANSIESTA - sessions pràctiques: transport a través d'una molècula i de nanocintetes de grafè.
- Dinàmica molecular (MD) amb force fields clàssics: col·lectivitats micro/macrocànòniques, termostats, forces intermoleculars, force fields per sistemes biològics. Codi Lammmps - sessions pràctiques: aigua a través d'un nanotub de carboni, i enllaç antígen-anticòs.
- Models de continu: equacions de continuïtat: massa, moment, energia. Difusió, conducció de la calor, fluids, elasticitat, formalisme k.p. Codi Elmer Multiphysics - sessions pràctiques: vibracions en nanofils de Si, i flexió d'un pont de Si degut a la dilatació tèrmica.

## Metodologia

Uns 2/5 de les classes seran tradicionals, i els 3/5 restants seran sessions pràctiques amb els diferents codis. Les activitats fora de classe inclouran la lectura d'articles d'investigació, i dur a terme petits treballs/simulacions expandint el que s'ha explicat a classe.

## Activitats formatives

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Tipus: Dirigides			
Classe magistral	15	0,6	1, 4, 5, 6, 7, 11
Tipus: Supervisades			
Demostracions pràctiques	22	0,88	1, 5, 6, 9, 10, 11
Tipus: Autònomes			

## Avaluació

Es podrà requerir un examen final en casos molt específics.

## Activitats d'avaluació

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Assistència i participació a classe	5%-10%	0	0	3, 8
Exposició d'un article	10%-15%	5	0,2	1, 2, 3, 4, 6, 8, 9
Informes de pràctiques - Dinàmica Molecular	20%-25%	20	0,8	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11
Informes de pràctiques - Mètodes de continu	25%-30%	20	0,8	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11
Informes de pràctiques - Primers principis	30%-35%	25	1	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11

## Bibliografia

J. M. Thijssen. Computational Physics (Cambridge University Press, 1999)

R. M. Martin. Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods (Cambridge University Press, 2004).

S. Datta, Electronic transport in mesoscopic systems (Cambridge University Press, 1995)

D. C. Rapaport, The Art of Molecular Dynamics Simulations (Cambridge University Press, 1995)

D. Frenkel, B. Smit, Understanding Molecular Simulations: from algorithms to applications, Academic Press (1996).

O.C. Zienkiewicz, R.L. Taylor and J.Z. Zhu, The Finite Element Method: Its Basis and Fundamentals (6th Ed, Elsevier Butterworth-Heinemann, 2005) Sections 3.1-3.3