

Técnicas de Simulación

Código: 43440
Créditos ECTS: 6

Titulación	Tipo	Curso	Semestre
4314939 Nanociencia y Nanotecnología Avanzadas / Advanced Nanoscience and Nanotechnology	OT	0	1

La metodología docente y la evaluación propuestas en la guía pueden experimentar alguna modificación en función de las restricciones a la presencialidad que impongan las autoridades sanitarias.

Contacto

Nombre: Xavier Cartoixa Soler

Correo electrónico: Xavier.Cartoixa@uab.cat

Uso de idiomas

Lengua vehicular mayoritaria: inglés (eng)

Equipo docente

Francesc Torres Canals

Laura Masgrau Fontanet

Xavier Solans Monfort

Prerequisitos

Se requerirán nociones básicas de mecánica cuántica para la parte del curso de ab initio.

Objetivos y contextualización

Introducción al uso de software para el cálculo de propiedades físicas y químicas en la nanoescala, y perspectiva de los formalismos subyacentes.

Competencias

- Buscar información en la literatura científica utilizando los canales apropiados e integrar dicha información para plantear y contextualizar un tema de investigación.
- Dominar la terminología científica y desarrollar la habilidad de argumentar los resultados de la investigación en el contexto de la producción científica, para comprender e interactuar eficazmente con otros profesionales.
- Identificar las técnicas de caracterización y análisis propios de la nanotecnología y conocer sus fundamentos, dentro de su especialidad.
- 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
- 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
- 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

Resultados de aprendizaje

1. Analizar la complejidad subyacente y los límites computacionales de los distintos métodos de resolución de las ecuaciones descriptivas del modelo.
2. Buscar información en la literatura científica utilizando los canales apropiados e integrar dicha información para plantear y contextualizar un tema de investigación.
3. Dominar la terminología científica y desarrollar la habilidad de argumentar los resultados de la investigación en el contexto de la producción científica, para comprender e interactuar eficazmente con otros profesionales.
4. Identificar la técnica computacional más adecuada al problema abordado
5. Identificar las ecuaciones que rigen la dinámica molecular newtoniana, el transporte electrónico de primeros principios y la dinámica de estructuras.
6. Interpretar las capacidades de una técnica de simulación y sus limitaciones fundamentales en función de los términos que el modelo incorpora.
7. 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
8. 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
9. 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
10. Utilizar autónomamente herramientas de simulación para obtener una mayor comprensión en situaciones experimentales.
11. Utilizar de forma eficiente técnicas computacionales para el estudio de problemas científicos relativos a los materiales y a la nanoescala.

Contenido

- Breve introducción a Linux.
- Métodos ab-initio para el transporte electrónico: teoría de funcional densidad (DFT), ecuaciones de Kohn-Sham, ondas planas y orbitales cuasi-atómicos. Fundamentos del transporte balístico. Funciones de Green fuera del equilibrio. Obtención de coeficientes de transmisión con TRANSIESTA - sesiones prácticas: transporte a través de una molécula y de nanocintas de grafeno.
- Dinámica molecular (MD) con force fields clásicos: colectividades micro/macrocánicas, termostatos, fuerzas intermoleculares, force fields para sistemas biológicos. Código LAMMPS - sesiones prácticas: agua a través de un nanotubo de carbono, y enlace antígeno-anticuerpo.
- Modelos de continuo: ecuaciones de continuidad: masa, momento, energía. Difusión, conducción del calor, fluidos, elasticidad, formalismo k.p. Código Elmer Multiphysics - sesiones prácticas: vibraciones en nanohilos de Si, y flexión de un puente de Si debido a la dilatación térmica.

Metodología

Unos 2/5 de las clases serán tradicionales, y los 3/5 restantes serán sesiones prácticas con los diferentes códigos. Las actividades fuera de clase incluirán la lectura de artículos de investigación, y realizar pequeños trabajos/simulaciones expandiendo lo explicado en clase.

Las clases magistrales y demostraciones prácticas podrán ser online en función de la situación sanitaria.

Actividades

Título	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
Tipo: Dirigidas			
Clase magistral	15	0,6	1, 4, 5, 6, 8, 11

Tipo: Supervisadas

Demostraciones prácticas	22	0,88	1, 5, 6, 7, 10, 11
Tipo: Autónomas			
Trabajo autónomo	43	1,72	2, 8, 7, 10

Evaluación

Se podrá requerir un examen final en casos muy específicos.

Actividades de evaluación

Título	Peso	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
Asistencia y participación en clase	5%-10%	0	0	3, 9
Exposición de un artículo	10%-15%	5	0,2	1, 2, 3, 4, 6, 9, 7
Informes de prácticas - Dinámica Molecular	20%-25%	20	0,8	1, 2, 3, 4, 5, 6, 8, 9, 7, 10, 11
Informes de prácticas - Métodos de continuo	25%-30%	20	0,8	1, 2, 3, 4, 5, 6, 8, 9, 7, 10, 11
Informes de prácticas - Primeros principios	30%-35%	25	1	1, 2, 3, 4, 5, 6, 8, 9, 7, 10, 11

Bibliografía

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