

Simulació de Sistemes Nanomètrics

Codi: 103304

Crèdits: 6

Titulació	Tipus	Curs	Semestre
2501922 Nanociència i Nanotecnologia	OT	4	2

Professor/a de contacte

Nom: Jordi Faraudo Gener

Correu electrònic: jordi.faraudo@uab.cat

Idiomes dels grups

Podeu accedir-hi des d'aquest [enllaç](#). Per consultar l'idioma us caldrà introduir el CODI de l'assignatura. Tingueu en compte que la informació és provisional fins a 30 de novembre de 2023.

Equip docent

Jordi Faraudo Gener

Equip docent extern a la UAB

Pol Febrer

Prerequisits

No hi ha cap prerequisit. És recomanable tenir interès per a l'ús d'ordinadors per a resoldre problemes científics. No són necessaris coneixements previs de programació però si ja es tenen, són útils durant el desenvolupament del curs.

Objectius

L'objectiu d'aquesta assignatura és ser capaç d'utilitzar els principals mètodes de simulació computacionals aplicats a sistemes nanomètrics, i conèixer les possibilitats i les limitacions de cada tècnica. En particular, els objectius específics són: (a) introduir les bases de la programació i conèixer l'estructura general dels codis de simulació en llenguatges de programació científica més freqüents, (b) ser capaç d'entendre els principis fonamentals del càlcul d'estructura electrònica, mètodes de montecarlo i dels algorismes de dinàmica molecular i (c) utilitzar aquests mètodes computacionals en l'estudi de sistemes nanotecnològics i bionotecnològics.

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.
- Obtenir, 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. Obtenir, 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

1. Introducció a la programació científica en llenguatge python: ús de llibreries científiques i numèriques. Solució numèrica de models en nanociència. Aplicació a equacions, lleis i models estudiats en les diverses assignatures del grau.
2. Algoritmes bàsics de simulació en nanociència: Mètodes de MonteCarlo, Dinàmica Molecular i càlculs d'estructura electrònica (DFT). Exemples en nanociència.
3. Us de programari científic actual per a resoldre problemes de nanociència, nanotecnologia i bionanociència. Simulacions atomístiques en exemples realistes en nanociència utilitzant implementacions dels diferents mètodes en programari científic avançat.

Metodologia

En tractar-se d'una assignatura eminentment pràctica, la metodologia de l'assignatura es basa majoritàriament en sessions pràctiques als laboratoris de computació de la facultat. Es realitzaran també les classes magistrals necessàries per a introduir els conceptes previs utilitzats al laboratori de computació. A les diferents sessions es fomentarà la participació i discussió a classe, podent-se realitzar "quizzes" i valorant-se la participació activa. Al laboratori de computació es realitzaran pràctiques introductòries dels diferents mètodes, tutorials, exercicis amb ordinador i un projecte final de síntesi pràctic de l'assignatura, que s'haurà d'exposar públicament a classe.

Observació: Degut a que el material utilitzat a classe (programari, articles, manuals) correspon a material científic real utilitzat per la comunitat científica, aquest es troba únicament en anglès.

Nota: es reservaran 15 minuts d'una classe, dins del calendari establert pel centre/titulació, per a la complementació per part de l'alumnat de les enquestes d'avaluació de l'actuació del professorat i d'avaluació de l'assignatura/mòdul.

Activitats formatives

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Tipus: Dirigides			
Classes teòriques i sessions de	14	0,56	1, 5, 6, 8, 9, 10, 11, 13, 15, 16, 17, 18, 20, 21, 22, 23, 24, 25,

discussió			26, 27, 28
Pràctiques d'Aula	18	0,72	1, 2, 3, 6, 8, 10, 11, 13, 14, 16, 20, 21, 22, 23, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31
Pràctiques de laboratori computacional	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			
Lectures, exercicis, informes de pràctiques i projectes	54	2,16	1, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 30, 31

Avaluació

Es realitzarà una avaluació continuada mitjançant els següents instruments:

- Pràctiques obligatòries amb entrega d'informe de pràctica (LB). (20%)
- Entrega d'exercicis o problemes (PB) relacionats amb els conceptes bàsics exposats en les sessions. (20%)
- Participació en les discussions i "quizzes" en les sessions teòriques (Q) (20%)
- Projecte o treball Final de síntesi (PJ) que inclou tant l'entrega del treball realitzat com una presentació oral. (40%)

Les activitats d'avaluació continua tenen com a objectiu avaluar el seguiment diari de l'assignatura i per tant igual que en el cas de les pràctiques no estan subjectes a recuperació.

En cas de que no es compleixin un mínim de 2/3 de les pràctiques (LB) o de que no es presenti el treball final (PJ), la qualificació final serà de NO AVALUABLE.

Activitats d'avaluació continuada

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Exercicis i problemes	20%	10	0,4	6, 8, 10, 11, 13, 17, 21, 22, 23, 27, 28
Projecte pràctic final	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, 25, 27, 28, 29, 30, 31
Qüestionaris, "quizzes" i participació en discussions i debats	20%	4	0,16	4, 10, 11, 15, 17, 18, 24
informes pràctiques de laboratori	20%	10	0,4	2, 3, 4, 7, 8, 10, 14, 16, 17, 21, 22, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31

Bibliografia

- "Understanding Molecular Simulation"

Daan Frenkel and Berend Smit, Academic Press, 2n edition 2002, 3rd Edition 2023

https://bibcercador.uab.cat/permalink/34CSUC_UAB/1c3utr0/cdi_askewsholts_vlebooks_9780080519982

2) "Simulating the Physical World: Hierarchical Modeling from Quantum Mechanics to Fluid Dynamics"

Berendsen, Herman J. C. (Cambridge University Press, 2007)

https://bibcercador.uab.cat/permalink/34CSUC_UAB/1c3utr0/cdi_skillsoft_books24x7_bke00023160

3) "Molecular Modelling Basics"

Jan H. Hensen, CRC Press, 2010

<http://molecularmodelingbasics.blogspot.com/>

Programari

Visual Molecular Dynamics (VMD) <https://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>

NANoscale Molecular Dynamics (NAMD) <https://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/>

Spanish Initiative for Electronic Simulations with Thousands of Atoms - SIESTA
<https://siesta-project.org/siesta/>

Programari en Python de l'assignatura disponible a GitHub: <https://github.com/jfaraudo>