

Simulación de Sistemas Nanométricos

Código: 103304
Créditos ECTS: 6

Titulación	Tipo	Curso	Semestre
2501922 Nanociencia y Nanotecnología	OT	4	2

Contacto

Nombre: Jordi Faraudo Gener

Correo electrónico: jordi.faraudo@uab.cat

Idiomas de los grupos

Puede consultarlo a través de este [enlace](#). Para consultar el idioma necesitará introducir el CÓDIGO de la asignatura. Tenga en cuenta que la información es provisional hasta el 30 de noviembre del 2023.

Equipo docente

Jordi Faraudo Gener

Equipo docente externo a la UAB

Pol Febrer

Prerrequisitos

No hay prerrequisitos. Es recomendable tener interés en el uso de ordenadores para resolver problemas científicos. No son necesarios conocimientos previos de programación aunque si ya se tienen serán útiles durante el desarrollo del curso.

Objetivos y contextualización

El objetivo de esta asignatura es ser capaz de utilizar los principales métodos de simulación computacionales aplicados a sistemas nanométricos, y conocer las posibilidades y limitaciones de cada técnica. En particular, los objetivos específicos son: (a) introducir las bases de la programación y conocer la estructura general de los códigos de simulación en lenguajes de programación científica más frecuentes; (b) ser capaz de entender los principios fundamentales del cálculo de estructura electrónica, métodos de montecarlo y de los algoritmos de dinámica molecular y (c) utilizar estos métodos computacionales en el estudio de sistemas nanotecnológicos y bionanotecnológicos.

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 nanoescala.
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 nanoescala (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

1. Introducción a la programación científica en lenguaje python: uso de librerías científicas. Solución numérica de modelos en nanociencia. Aplicación a ecuaciones, leyes y modelos estudiados en las distintas asignaturas del grado.
2. Algoritmos básicos de simulación en nanociencia: Métodos de MonteCarlo, Dinámica Molecular y cálculos de estructura electrónica (DFT). Ejemplos en nanociencia.
3. Uso de software científico actual para resolver problemas de nanociencia, nanotecnología y bionanociencia. Simulaciones atomísticas: ejemplos realistes en nanociencia usando implementaciones de los distintos método en software científico avanzado.

Metodología

Esta es una asignatura eminentemente práctica, y por ello la metodología de la asignatura se basa mayoritariamente en sesiones prácticas en los laboratorios de computación de la facultad. Se realizarán también las clases magistrales necesarias para introducir los conceptos previos utilizados en el laboratorio de computación. En las distintas sesiones se fomentará la participación y discusión en clase pudiendo realizarse "quizzes" y valorándose la participación activa. En el laboratorio de computación se realizarán prácticas introductorias de los diferentes métodos, tutoriales, ejercicios con ordenador y un proyecto final de síntesis práctico de la asignatura, que deberá exponerse públicamente en clase.

Observación: el material utilizado en clase (programario, artículos, manuales) corresponde a material científico real utilizado por la comunidad científica, y éste se encuentra únicamente en inglés.

Nota: se reservarán 15 minutos de una clase dentro del calendario establecido por el centro o por la titulación para que el alumnado rellene las encuestas de evaluación de la actuación del profesorado y de evaluación de la asignatura o módulo.

Actividades

Título	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
Tipo: Dirigidas			
Clases teóricas y sesiones de discusión	14	0,56	1, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 23, 15, 14, 16, 17, 19, 20, 21, 22, 24, 25, 26, 27, 28
Prácticas de Aula	18	0,72	1, 2, 3, 6, 7, 9, 10, 23, 13, 14, 19, 20, 21, 22, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31
Prácticas de laboratorio computacional	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
Tipo: Autónomas			
Lecturas, ejercicios, informes de prácticas y proyectos	54	2,16	1, 3, 4, 5, 6, 11, 7, 9, 10, 12, 23, 13, 15, 14, 16, 17, 19, 20, 21, 22, 24, 25, 26, 27, 28, 30, 31

Evaluación

Se realizará una evaluación continuada mediante los siguientes instrumentos:

- Prácticas obligatorias con entrega de informe de prácticas (LB). (20%)
- Entrega de ejercicios o problemas (PB) relacionados con los conceptos básicos expuestos en las sesiones. (20%)
- Participación en las discusiones y "quizzes" en las sesiones teóricas (Q) (20%)
- Proyecto o trabajo Final de síntesis (PJ) que incluye tanto la entrega del trabajo realizado como una presentación oral. (40%)

Las actividades de evaluación continua tienen como objetivo evaluar el seguimiento diario de la asignatura y por tanto igual que en el caso de las prácticas no están sujetas a recuperación.

En el caso de que no se completen un mínimo de 2/3 de las prácticas (LB) o de que no se presente el trabajo final (PJ), la calificación final será de "NO AVALUABLE".

Actividades de evaluación continuada

Título	Peso	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
Cuestionarios, "quizzes" y participación en discusiones y debates	20%	4	0,16	4, 9, 10, 15, 16, 17, 24
Ejercicios y problemas	20%	10	0,4	6, 7, 9, 10, 23, 16, 20, 21, 22, 27, 28
Informes prácticas de laboratorio	20%	10	0,4	2, 3, 4, 11, 7, 9, 13, 14, 16, 20, 21, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31
Proyecto práctico final	40%	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

1) "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/>

Software

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/>

Software en Python de la asignatura disponible en GitHub: <https://github.com/jfaraudo>