

Titulación	Tipo	Curso
Nanociencia Aplicada: de Materiales a Dispositivos / Applied Nanoscience: From Materials to Devices	OP	1

Profesor/a de contacto

Nombre : Jordi Faraudo Gener

Correo electrónico : jordi.faraudo@uab.cat

Equipo docente

Jean-Didier Pierre Marechal

Idiomas de los grupos

Puede consultar esta información al [final](#) del documento.

Prerrequisitos

No existen requisitos académicos previos para inscribirse. Dado que se trata de un curso de carácter computacional, es deseable tener interés por la programación o la computación en general. Contar con conocimientos previos de Python u otros lenguajes de programación resulta útil, aunque no es imprescindible.

Objetivos

El objetivo de este curso es proporcionar métodos de simulación computacional para el estudio de sistemas de materia blanda a escala nanométrica. El término general «materia blanda» abarca numerosos materiales organizados (y autoorganizados) en la nanoescala en un estado intermedio entre el sólido y el líquido, donde la entropía, el orden y el desorden desempeñan un papel fundamental. Estos materiales incluyen, entre otros, polímeros, hidrogeles, cristales líquidos, vesículas, nanopartículas (orgánicas e inorgánicas) y materiales supramoleculares, así como materia biológica (desde biomoléculas como ácidos nucleicos, proteínas, lípidos y sus agregados, hasta virus). El curso abordará algunos de los conceptos teóricos básicos utilizados para describir estos nanosistemas (tales como fluctuaciones y ruido, autoensamblaje o acoplamiento y reconocimiento molecular) desde una perspectiva práctica y computacional.

Resultados de aprendizaje

- CA19 (Diseñar la modelización de materiales blandos usando las técnicas de simulación apropiadas.)
Diseñar la modelización de materiales blandos usando las técnicas de simulación apropiadas.
- CA20 (Comparar los resultados de simulación de materia blanda con datos experimentales de la

propiedad objeto de estudio cuando éstos existan.) Comparar los resultados de simulación de materia blanda con datos experimentales de la propiedad objeto de estudio cuando éstos existan.

- KA18 (Identificar la técnica computacional más adecuada en la descripción de procesos de interacción entre nanomateriales y entidades biológicas.) Identificar la técnica computacional más adecuada en la descripción de procesos de interacción entre nanomateriales y entidades biológicas.
- KA19 (Identificar las ecuaciones que rigen la dinámica molecular newtoniana y la dinámica de estructuras.) Identificar las ecuaciones que rigen la dinámica molecular newtoniana y la dinámica de estructuras.
- SA24 (Utilizar software libre de dinámica molecular para estudiar procesos biológicos y su interacción con nanomateriales.) Utilizar software libre de dinámica molecular para estudiar procesos biológicos y su interacción con nanomateriales.
- SA25 (Programar en matlab o python procesos de crecimiento y biológicos.) Programar en matlab o python procesos de crecimiento y biológicos.
- SA26 (Analizar las capacidades y restricciones fundamentales de las técnicas de simulación de materia blanda en base a los términos que el modelo incluye.) Analizar las capacidades y restricciones fundamentales de las técnicas de simulación de materia blanda en base a los términos que el modelo incluye.

Contenidos

La asignatura consta de dos partes bien diferenciadas:

- Introducción a la simulación de materia blanda: Introducción a las técnicas básicas de simulación (dinámica molecular y Montecarlo, tanto a nivel atómico como de grano grueso). Ejemplos introductorios de sistemas de materia blanda seleccionados (posibles casos: polímeros, nanopartículas en disolución, autoensamblaje de nanoobjetos, nanoporos).
- Aplicación a bionanosistemas: Aplicación en profundidad de los métodos a sistemas biomoleculares, con especial énfasis en las proteínas como ejemplo paradigmático.

Actividades formativas y Metodología

Título	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
Sesiones prácticas	38	1,52	CA19, CA20, KA18, KA19, SA24, SA26
Preparación de las sesiones y trabajo previo con materiales de apoyo	24	0,96	CA19, CA20, KA18, KA19, SA24, SA26
Proyecto Final	10	0,4	CA19, CA20, KA18, KA19, SA24, SA26

La metodología seguirá un modelo de aprendizaje activo, basado en el enfoque de clase invertida parcial. Por lo general, las sesiones tendrán un carácter práctico y se desarrollarán siguiendo este protocolo:

1. Unos días antes de la clase, se proporcionará material introductorio sobre los conocimientos teóricos y prácticos de la actividad (vídeos de introducción de los profesores, documentos de estudio, enlaces de internet, etc.). Este material puede incluir algunos ejercicios básicos para resolver.
2. El día programado para cada sesión, los profesores repasan brevemente los conceptos fundamentales y los/las estudiantes resuelven casos prácticos bajo supervisión.
3. Al finalizar la sesión, se deberá realizar una prueba en línea de forma presencial, con una duración de entre 10 y 20 minutos. No está permitido realizar la prueba desde un aula o lugar distinto al asignado para la clase presencial.

Al concluir el módulo, se realizará un proyecto más avanzado relacionado con los contenidos del curso, el cual incluirá una presentación oral.

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.

Evaluación

Actividades de evaluación continuada

Título	Peso	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
Prueba breve al final de sesión (9 pruebas)	45%	3	0,12	KA18, KA19, SA24, SA25, SA26
portafolios de trabajos de clase	10%	0	0	CA19, CA20, KA18, KA19, SA25, SA26
Proyecto Final	45%	0	0	CA19, CA20, KA18, KA19, SA24, SA25, SA26

Se llevará a cabo una evaluación continua mediante los siguientes instrumentos:

- Pruebas obligatorias al finalizar las sesiones prácticas (se programarán alrededor de 9 pruebas, sujetas a cambios) con una duración de entre 10 y 20 minutos. No está permitido realizar la prueba desde un aula o lugar distinto al asignado para la clase presencial.
- Un proyecto final de síntesis, de mayor complejidad y basado en los contenidos de la asignatura, que será realizado por el estudiante. La entrega del proyecto incluye los datos originales (así como todas las evidencias necesarias para acreditar la autoría del trabajo), un informe redactado por el estudiante y una presentación oral.

También será necesario mantener un portafolios de las prácticas y simulaciones hechas en clase, que se evaluará.

Las actividades de evaluación continua tienen como objetivo valorar el seguimiento diario de la asignatura y, por tanto, no son recuperables.

NOTA: El uso de herramientas de IA solo está permitido en aquellos casos o tareas específicos autorizados explícitamente por el profesor.

Bibliografía

Computer Simulation of Soft Matter:

1.- Carbone, P. (2025). *Computational Methods for the Multiscale Modeling of Soft Matter*. (1st ed.). Elsevier Science & Technology. Available in the library and online for UAB students.

Computer Simulation methods:

1.- Frenkel, D., & Smit, B. (2023). *Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications* (Third edition). Elsevier Science & Technology. Available in the library and online for UAB students.

2.- Berendsen, H. J. C. (2007). *Simulating the Physical World: Hierarchical Modeling from Quantum Mechanics to Fluid Dynamics* (1st ed.). Cambridge University Press. <https://doi.org/10.1017/CBO9780511815348>

Available in the library and online for UAB students.

3.- Jensen, F. (2017). *Introduction to Computational Chemistry* (3e éd.). John Wiley & Sons. Available in the library and online for UAB students.

4.- Leach, A. R. (2001). *Molecular modelling: Principles and applications* (2nd ed.). Pearson Education. Disponible en la biblioteca.

Introductory texts on Soft Matter:

1.- Dutta, A. K. (2025). *Soft Matter : Fundamentals and Applications* (1st ed. 2025.). Springer Nature Singapore. <https://doi.org/10.1007/978-981-96-0624-5>. Available in the library and online for UAB students.

2.- Piazza, R. (2011). *Soft matter : the stuff that dreams are made of* (1st ed. 2011.). Copernicus Books. <https://doi.org/10.1007/978-94-007-0585-2>. Available in the library and online for UAB students.

3.- Jones, R. A. L. (Richard A. L. (2007). *Soft machines : nanotechnology and life* (1st ed.). Oxford University Press. <https://doi.org/10.1093/oso/9780198528555.001.0001> Available in the library and online for UAB students.

Software

- Python programming language including scientific libraries
- Google Collab
- VMD molecular visualization software
- OpenMM simulation package
- Autodock Vina

Grupos e idiomas de la asignatura

La información proporcionada es provisional hasta el 30 de noviembre. A partir de esta fecha, podrá consultar el idioma de cada grupo a través de este [enlace](#). Para acceder a la información, será necesario introducir el CÓDIGO de la asignatura

Tipo de docencia	Grupo	Idioma	Semestre	Turno
(TEm) Teoría (máster)	1	Inglés	primer cuatrimestre	tarde