

## GUÍA DOCENTE ABREVIADA DE LA ASIGNATURA

M1308 - Simulación y Modelización de Nuevos Materiales

Máster Universitario en Nuevos Materiales

Curso Académico 2021-2022

1. DATOS IDENTIFICATIVOS					
Título/s	Máster Universitario en Nuevos Materiales			Tipología v Curso	Optativa. Curso 1
Centro	Facultad de Ciencias				
Módulo / materia	MÓDULO OPTATIVO GENERAL				
Código y denominación	M1308 - Simulación y Modelización de Nuevos Materiales				
Créditos ECTS	5	Cuatrimestre	Cuatrimestral (2)		
Web					
Idioma de impartición	Español	English friendly	No	Forma de impartición	Presencial

Departamento	DPTO. CIENCIAS DE LA TIERRA Y FISICA DE LA MATERIA CONDENSADA				
Profesor responsable	FRANCISCO JAVIER JUNQUERA QUINTANA				
E-mail	javier.junquera@unican.es				
Número despacho	Facultad de Ciencias. Planta: + 3. DESPACHO - INVESTIGADOR (RAMON Y CAJAL) (3012)				
Otros profesores	DIEGO FERREÑO BLANCO EDUARDO OGANDO ARREGUI EDUARDO FERNÁNDEZ MARTÍN				

### 3.1 RESULTADOS DE APRENDIZAJE

- Cálculo de las propiedades electrónicas de átomos multielectrónicos: energía de enlace, potenciales de ionización, transiciones ópticas en átomos. Estructura electrónica de nanoagregados: configuración de equilibrio, estados metaestables, densidades de estados electrónicos, reactividad, propiedades vibracionales,.. Cálculo de las propiedades de sólidos.
- Cálculo de propiedades macroscópicas de materiales (elasticidad, conducción térmica,...)
- Conocimiento de los métodos computacionales y sus posibilidades para resolver problemas específicos del comportamiento microscópico y macroscópico de los materiales.
- Uso y familiaridad con las características y posibilidades de distintos programas de computación y simulación de materiales, como ejemplo de los muchos existentes.

### 4. OBJETIVOS

- Introducir al alumnado en los métodos de simulación y modelización por ordenador del comportamiento de los materiales. El alumnado deberá trabajar con dichos métodos.
- Presentar la teoría del funcional de la densidad DFT como método de simulación de las propiedades electrónicas basado en la descripción cuántica del sistema electrones-núcleos. Usar códigos de cálculo para átomos multielectrónicos, moléculas y sólidos (ejemplos: ABINIT, SIESTA).
- Para los sistemas macroscópicos: Resolución de problemas estructurales (elasticidad y plasticidad) electromagnéticos y térmicos (conducción y convección), así como la interacción entre ellos. Se usarán programas basados en el método de elementos finitos FEM.
- Resaltar la importancia fundamental de estos métodos en la moderna ciencia de materiales pues permiten no solo prever el comportamiento, ciclo de vida, etc, sino diseñar y mejorar el diseño de piezas o dispositivos en los que entran a formar parte dichos materiales.

### 6. ORGANIZACIÓN DOCENTE

#### CONTENIDOS

1	Sistemas de electrones: descripción cuántica. Ecuación de Schrödinger. Función de onda y densidad.
2	Teoría del funcional de la densidad (DFT). Ecuaciones de Kohn-Sham y métodos de resolución. Propiedades electrónicas átomos Multielectrónicos y de agregados usando el código SIESTA.
3	Supercomputación aplicada a cálculos de propiedades electrónicas usando el método del funcional de la densidad (DFT). Código SIESTA.
4	- Métodos de Elementos Finitos (FEM). Software de simulación y modelización. Descripción de diversos paquetes de simulación
5	- Métodos de Elementos Finitos (FEM) II Programa ANSYS. Problemas termomecánicos (elasticidad, plasticidad y conductividad térmica)
6	- Problemas Termomecánicos II (elasticidad, plasticidad y conductividad térmica). Problemas electromagnéticos.

## 7. MÉTODOS DE LA EVALUACIÓN

Descripción	Tipología	Eval. Final	Recuper.	%
Problemas cortos sobre simulación de propiedades de ciertos materiales.	Actividad de evaluación con soporte virtual	No	Sí	40,00
Memoria detallando la simulación computacional de los aspectos macroscópico y microscópico de un material	Trabajo	Sí	Sí	60,00
<b>TOTAL</b>				<b>100,00</b>
<b>Observaciones</b>				
Una vez entregadas las memorias, el profesorado podrá solicitar del alumnado su aclaración y/o modificación, antes de proceder a la evaluación final.				
<b>Criterios de evaluación para estudiantes a tiempo parcial</b>				
Deberán entregar también una memoria como el resto del alumnado. Este tipo de trabajo es posible realizarlo telemáticamente, por lo que el alumnado a tiempo parcial puede completar las simulaciones al igual que el resto del alumnado. Se tendrá una mayor flexibilidad en los plazos indicados antes. Es posible también asignarles problemas cortos específicos, al igual que a sus compañeros para completar la evaluación.				

## 8. BIBLIOGRAFÍA Y MATERIALES DIDÁCTICOS

### BÁSICA

- 1.-) Chapman A.J., "Transmisión de Calor", 3ª Edición, Editorial Bellisco, 1984, Madrid.
- 2.-) E. Oñate, B. Suarez, "Aplicaciones del Método de los Elementos Finitos en Ingeniería. Análisis de estructuras" (vol. 1). 477 pp., ISBN: 84-7653-010-2.
- 3.-) Zienkiewicz O C & Taylor R L. "The finite element method. Vol. I. Basic formulations and linear problems". London: McGraw-Hill, 1989. 648 p.; Vol. II. "Solid and fluid mechanics: dynamics and non-linearity". London: McGraw-Hill, 1991. 807 p.
- 4.-) Stanley Humphries, "Finite-element methods for electromagnetics" (1997) Download at <http://www.fieldp.com/femethods.html>.
- 5.-) K. Ohno, K. Esfarjani, and Y. Kawazoe "Computational Materials Science", (Springer, Berlin, 1999).
- 6.-) J. M. Thijssen, "Computational Physics", Cambridge University Press, Cambridge, 1999.- Daryl L. Logan, "A First Course in the Finite Element Method", 4ª ed. Cengage-Engineering, 2006.
- 7.-) Tirupathi R. Chandrupatla and Ashok D. Belegundu, "Introduction to Finite Elements in Engineering", 3ª ed. Prentice Hall, 2002
- 8.-) R. Eisberg y R. Resnik, "Física Cuántica: Átomos, Moléculas, Sólidos, Núcleos y Partículas", México, Limusa, 1978
- 9.-) R. G. Parr y W. Yang, "Density Functional Theory of Atoms and Molecules" (Oxford University Press, 1989)
- 10.-) J. Kohanoff, "Electronic Structure Calculations for Solids and Molecules. Theory and computational methods", Cambridge U P, Cambridge UK, 2006.
- 11.-) J. A. Alonso, "Structure and Properties of Atomic Nanoclusters", Imperial College Press, London, 2005
- 12.-) Richard M. Martin "Electronic structure: basic theory and practical methods", Cambridge University Press, 2004.
- 13.-) L. Ramdas Ram-Mohan. "Finite elements and boundary element applications in quantum mechanics", Oxford University Press, Oxford, 2002. .

Esta es la Guía Docente abreviada de la asignatura. Tienes también publicada en la Web la información más detallada de la asignatura en la Guía Docente Completa.