

Facultad de Ciencias

GUÍA DOCENTE DE LA ASIGNATURA

M1308 - Simulación y Modelización de Nuevos Materiales

Máster Universitario en Nuevos Materiales
Optativa. Curso 1

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 |

2. CONOCIMIENTOS PREVIOS

- Descripción cuántica de la estructura de la materia: Propiedades electrónicas elementales de átomos (estructura de capas), moléculas (enlace molecular, rotaciones y vibraciones) y sólidos (bandas de energía)
- Quantum description of the structure of matter: Elementary electronic properties of atoms (electronic shell structure), molecules (bond formation, molecular rotations and vibrations), and crystalline solids (energy bands)
- Propiedades macroscópicas de los materiales: problemas estructurales (elasticidad y plasticidad), electromagnéticos y térmicos (conducción y convección), así como la interacción entre ellos.
- Macroscopic properties of materials: Structural problems (elasticity and plasticity), electromagnetic and thermal properties (conduction and convection), and interactions between them.
- Conocimientos básicos de Linux.
- Basic knowledge of Linux.

3. COMPETENCIAS GENÉRICAS Y ESPECÍFICAS DEL PLAN DE ESTUDIOS TRABAJADAS

| Competencias Genéricas |
|---|
| Reconocimiento y aplicación de los conceptos, principios y teorías propias de la ciencia de nuevos materiales. |
| Ser capaz de analizar, proponer métodos de resolución y contribuir a la resolución efectiva de problemas técnicos o sociales concretos en que se involucre la ciencia de materiales, dentro de grupos multidisciplinares. |
| Ser capaz de identificar críticamente las novedades de mayor repercusión y de adquirir de manera autónoma nuevos conocimientos en ciencia de materiales, tanto a partir de la bibliografía especializada, como del contacto personal con especialistas en el campo. |
| Ser capaz de exponer y comunicar resultados relevantes, tanto del propio trabajo como del de otros investigadores en el campo de nuevos materiales, así como sus implicaciones en la sociedad ante audiencias especializadas multidisciplinares e, incluso, ante el público en general. |
| Capacidad para participar, bajo la supervisión de doctores, en el planteamiento y desarrollo de proyectos de investigación científica en el área del máster que, eventualmente, permitan realizar una Tesis Doctoral. |
| Competencias Específicas |
| Capacidad de análisis, síntesis y gestión de información sobre la ciencia de nuevos materiales. |
| Aprendizaje y trabajo autónomo y creativo en relación a la temática planteada en el Máster. |
| Capacidad de organización y planificación del trabajo personal, así como la motivación por la realización de un trabajo excelente. |
| Comunicación oral y escrita en la lengua nativa y en inglés, en lo que respecta al campo de nuevos materiales. |
| Capacidad para desarrollar trabajo en equipo, establecer relaciones interpersonales y tomar decisiones. |
| Ser capaz de desarrollar trabajos prácticos dirigidos. |
| Tener la capacidad de aplicar las herramientas de la ciencia de los nuevos materiales en la investigación de alto nivel. |

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.

5. MODALIDADES ORGANIZATIVAS Y MÉTODOS DOCENTES

| ACTIVIDADES | HORAS DE LA ASIGNATURA |
|---|------------------------|
| ACTIVIDADES PRESENCIALES | |
| HORAS DE CLASE (A) | |
| - Teoría (TE) | 15 |
| - Prácticas en Aula (PA) | 35 |
| - Prácticas de Laboratorio Experimental(PLE) | |
| - Prácticas de Laboratorio en Ordenador (PLO) | |
| - Prácticas Clínicas (CL) | |
| Subtotal horas de clase | 50 |
| ACTIVIDADES DE SEGUIMIENTO (B) | |
| - Tutorías (TU) | 4 |
| - Evaluación (EV) | 4 |
| Subtotal actividades de seguimiento | 8 |
| Total actividades presenciales (A+B) | 58 |
| ACTIVIDADES NO PRESENCIALES | |
| Trabajo en grupo (TG) | |
| Trabajo autónomo (TA) | 67 |
| Tutorías No Presenciales (TU-NP) | |
| Evaluación No Presencial (EV-NP) | |
| Total actividades no presenciales | 67 |
| HORAS TOTALES | 125 |

| 6. ORGANIZACIÓN DOCENTE | | | | | | | | | | | | | |
|-------------------------|---|-------|-------|------|------|------|------|------|------|-------|-------|-------|------------|
| CONTENIDOS | | TE | PA | PLE | PLO | CL | TU | EV | TG | TA | TU-NP | EV-NP | Semana |
| 1 | Sistemas de electrones: descripción cuántica. Ecuación de Schrödinger. Función de onda y densidad. | 1,50 | 3,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 10,00 | 0,00 | 0,00 | 14/04/2020 |
| 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. | 3,00 | 8,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 1,00 | 1,00 | 0,00 | 10,00 | 0,00 | 0,00 | 18/05/2020 |
| 3 | Supercomputación aplicada a cálculos de propiedades electrónicas usando el método del funcional de la densidad (DFT). Código SIESTA. | 3,00 | 7,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 1,00 | 1,00 | 0,00 | 14,00 | 0,00 | 0,00 | 5/05/2020 |
| 4 | - Métodos de Elementos Finitos (FEM). Software de simulación y modelización. Descripción de diversos paquetes de simulación | 3,00 | 3,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 10,00 | 0,00 | 0,00 | 12/05/2020 |
| 5 | - Métodos de Elementos Finitos (FEM) II Programa ANSYS. Problemas termomecánicos (elasticidad, plasticidad y conductividad térmica) | 1,50 | 7,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 1,00 | 1,00 | 0,00 | 10,00 | 0,00 | 0,00 | 16/05/2020 |
| 6 | - Problemas Termomecánicos II (elasticidad, plasticidad y conductividad térmica). Problemas electromagnéticos. | 3,00 | 7,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 1,00 | 1,00 | 0,00 | 13,00 | 0,00 | 0,00 | 10/05/2020 |
| TOTAL DE HORAS | | 15,00 | 35,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 4,00 | 4,00 | 0,00 | 67,00 | 0,00 | 0,00 | |

Esta organización tiene carácter orientativo.

Ante la situación incierta de que las medidas de distanciamiento social establecidas por las autoridades sanitarias no permitan desarrollar alguna actividad docente de forma presencial en el aula para todos los estudiantes matriculados, se adoptará una modalidad mixta de docencia que combine esta docencia presencial en el aula con docencia a distancia. De la misma manera, la tutorización podrá ser sustituida por tutorización a distancia utilizando medios telemáticos.

| | |
|-------|--|
| TE | Horas de teoría |
| PA | Horas de prácticas en aula |
| PLE | Horas de prácticas de laboratorio experimental |
| PLO | Horas de prácticas de laboratorio en ordenador |
| CL | Horas de prácticas clínicas |
| TU | Horas de tutoría |
| EV | Horas de evaluación |
| TG | Horas de trabajo en grupo |
| TA | Horas de trabajo autónomo |
| TU-NP | Tutorías No Presenciales |
| EV-NP | Evaluación No Presencial |

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 | | | | | | | | | | |
| <table border="1"> <tr> <td>Calif. mínima</td> <td>5,00</td> </tr> <tr> <td>Duración</td> <td>Cuatro sesiones de Una hora</td> </tr> <tr> <td>Fecha realización</td> <td>Abril-Mayo</td> </tr> <tr> <td>Condiciones recuperación</td> <td>Corrección de errores. Completar las simulaciones</td> </tr> <tr> <td>Observaciones</td> <td>Problemas propuestos en clase que el alumnado ha de resolver con los programas utilizados en el curso.</td> </tr> </table> | | | | | Calif. mínima | 5,00 | Duración | Cuatro sesiones de Una hora | Fecha realización | Abril-Mayo | Condiciones recuperación | Corrección de errores. Completar las simulaciones | Observaciones | Problemas propuestos en clase que el alumnado ha de resolver con los programas utilizados en el curso. |
| Calif. mínima | 5,00 | | | | | | | | | | | | | |
| Duración | Cuatro sesiones de Una hora | | | | | | | | | | | | | |
| Fecha realización | Abril-Mayo | | | | | | | | | | | | | |
| Condiciones recuperación | Corrección de errores. Completar las simulaciones | | | | | | | | | | | | | |
| Observaciones | Problemas propuestos en clase que el alumnado ha de resolver con los programas utilizados en el curso. | | | | | | | | | | | | | |
| Memoria detallando la simulación computacional de los aspectos macroscópico y microscópico de un material | Trabajo | Sí | Sí | 60,00 | | | | | | | | | | |
| <table border="1"> <tr> <td>Calif. mínima</td> <td>5,00</td> </tr> <tr> <td>Duración</td> <td>Las dos semanas anteriores al 15 Junio 2017</td> </tr> <tr> <td>Fecha realización</td> <td>Junio</td> </tr> <tr> <td>Condiciones recuperación</td> <td>Corrección de errores en las simulaciones, tanto en los cálculos como en sus interpretaciones</td> </tr> <tr> <td>Observaciones</td> <td>El trabajo tendrá una limitación de páginas y deberá estructurarse como un informe de los resultados de una investigación: Resumen (traducido al inglés), Introducción (motivación y antecedentes), Metodología, Resultados, Discusión (incluyendo comparación con otros cálculos y en su caso con resultados experimentales), Conclusiones y Bibliografía. El trabajo deberá entregarse antes del 15 de Junio (dos semanas después de finalizadas las sesiones teórico-prácticas). Una vez realizada su evaluación por el profesorado, se propondrá en su caso, la realización de modificaciones que deberán entregarse en un plazo máximo de otras dos semanas (proceso de recuperación de la actividad).</td> </tr> </table> | | | | | Calif. mínima | 5,00 | Duración | Las dos semanas anteriores al 15 Junio 2017 | Fecha realización | Junio | Condiciones recuperación | Corrección de errores en las simulaciones, tanto en los cálculos como en sus interpretaciones | Observaciones | El trabajo tendrá una limitación de páginas y deberá estructurarse como un informe de los resultados de una investigación: Resumen (traducido al inglés), Introducción (motivación y antecedentes), Metodología, Resultados, Discusión (incluyendo comparación con otros cálculos y en su caso con resultados experimentales), Conclusiones y Bibliografía. El trabajo deberá entregarse antes del 15 de Junio (dos semanas después de finalizadas las sesiones teórico-prácticas). Una vez realizada su evaluación por el profesorado, se propondrá en su caso, la realización de modificaciones que deberán entregarse en un plazo máximo de otras dos semanas (proceso de recuperación de la actividad). |
| Calif. mínima | 5,00 | | | | | | | | | | | | | |
| Duración | Las dos semanas anteriores al 15 Junio 2017 | | | | | | | | | | | | | |
| Fecha realización | Junio | | | | | | | | | | | | | |
| Condiciones recuperación | Corrección de errores en las simulaciones, tanto en los cálculos como en sus interpretaciones | | | | | | | | | | | | | |
| Observaciones | El trabajo tendrá una limitación de páginas y deberá estructurarse como un informe de los resultados de una investigación: Resumen (traducido al inglés), Introducción (motivación y antecedentes), Metodología, Resultados, Discusión (incluyendo comparación con otros cálculos y en su caso con resultados experimentales), Conclusiones y Bibliografía. El trabajo deberá entregarse antes del 15 de Junio (dos semanas después de finalizadas las sesiones teórico-prácticas). Una vez realizada su evaluación por el profesorado, se propondrá en su caso, la realización de modificaciones que deberán entregarse en un plazo máximo de otras dos semanas (proceso de recuperación de la actividad). | | | | | | | | | | | | | |
| TOTAL | | | | 100,00 | | | | | | | | | | |
| Observaciones | | | | | | | | | | | | | | |
| Una vez entregadas las memorias, el profesorado podrá solicitar del alumnado su aclaración y/o modificación, antes de proceder a la evaluación final. | | | | | | | | | | | | | | |
| Criterios de evaluación para estudiantes a tiempo parcial | | | | | | | | | | | | | | |
| 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. .

Complementaria

Manuales de los programas ANSYS®, ADF, BAND y BigDFT
 Códigos ADF, BAND: <http://www.scm.com/>
 Código BigDFT: http://bigdft.org/Wiki/index.php?title=BigDFT_website/
 Código ANSYS: <http://www.ansys.com/>
 Código ABINIT: <http://www.abinit.org/>

9. SOFTWARE

| PROGRAMA / APLICACIÓN | CENTRO | PLANTA | SALA | HORARIO |
|-----------------------------------|---|---------|-----------------|---------|
| ANSYS | Escuela Técnica Superior de Ingenieros de Caminos CP UC | | Aulas Sim B1-B4 | |
| SIESTA, ABINIT, ADF, BAND, BigDFT | Facultad de Ciencias UC | Primera | 1007 | |
| ABINIT | Universidad del País Vasco | | | |

10. COMPETENCIAS LINGÜÍSTICAS

- | | |
|---|---|
| <input checked="" type="checkbox"/> Comprensión escrita | <input type="checkbox"/> Comprensión oral |
| <input checked="" type="checkbox"/> Expresión escrita | <input type="checkbox"/> Expresión oral |
| <input type="checkbox"/> Asignatura íntegramente desarrollada en inglés | |

Observaciones