



Asignatura	Simulaciones cuánticas de nanomateriales		
Materia	Simulaciones cuánticas de nanomateriales		
Módulo	Física de Materiales		
Titulación	Máster en Física		
Plan	617	Código	54415
Periodo de impartición	Primera mitad del segundo semestre	Tipo/Carácter	Optativa
Nivel/Ciclo	Máster	Curso	1º de Máster
Créditos ECTS	3		
Lengua en que se imparte	Castellano		
Profesor/es responsable/s	David J. González, Luis Enrique González, Andrés Aguado e Iván Cabria		
Departamento(s)	Departamento de Física Teórica, Atómica y Óptica		
Datos de contacto (E-mail, teléfono...)	david@metodos.fam.cie.uva.es aguado@metodos.fam.cie.uva.es ivan.cabria@uva.es luisen@metodos.fam.cie.uva.es		



1. Situación / Sentido de la Asignatura

1.1 Contextualización

Se trata de una asignatura optativa del módulo Física de Materiales. Es una asignatura que consiste principalmente en prácticas computacionales, con algunas clases de teoría sobre las simulaciones de las propiedades de la materia.

1.2 Relación con otras materias

Los contenidos de esta asignatura están relacionados con los contenidos de algunas asignaturas del módulo Común: "Computación en Física" y "Análisis de datos y técnicas Big Data", y del módulo Física de Materiales: "Nanociencia y Confinamiento Cuántico en Nanomateriales", "Modelado Computacional de Semiconductores y Procesos Tecnológicos, y "Propiedades y Modelado Computacional de Metamateriales".

1.3 Prerrequisitos

No hay prerrequisitos, pero se recomienda haber estudiado Física Cuántica, Mecánica Cuántica, Física Atómica y Física del Estado Sólido.



2. Competencias

2.1 Generales

- G1. Capacidad de aplicación de conocimientos adquiridos.
- G2. Capacidad crítica, de análisis y síntesis.
- G3. Capacidad de Comunicación.
- G4. Capacidad de aprendizaje autónomo.
- G5. Capacidad de trabajo en equipo.

2.2 Específicas

- C1. Comprensión de las bases científicas de la computación.
- C3. Capacidad para establecer órdenes de magnitud y para elegir el sistema de medida más adecuado en cada caso.
- C5. Capacidad para establecer algoritmos para abordar problemas con soluciones múltiples.
- C6. Capacidad para optimizar recursos.
- C8. Conocimiento de los fundamentos físicos avanzados en los diferentes estados de la materia.
- C10. Conocimiento de las bases teóricas de estudio de la física.
- C11. Conocimiento de los sistemas físicos en la frontera del conocimiento.

Competencias específicas de este módulo y de esta asignatura:

- Conocimiento de nuevos materiales basados en tecnología
- Comprensión de las propiedades físicas conducentes a la caracterización de materiales
- Interpretación de las técnicas de computación específicas en la modelización de estructuras de materiales.
- Capacidad para poder participar en actividades científicas internacionales y en la toma de decisiones científicas a nivel internacional.



3. Objetivos

1. Conocer los fundamentos teóricos de la teoría del funcional de la densidad (Density Functional Theory, DFT). Se trata de una de las teorías más usadas en el tratamiento mecano-cuántico de la materia con aplicaciones que van desde el estudio del enlace molecular al cálculo de la estructura de bandas en sólidos extensos. De hecho, recientemente ha empezado a utilizarse en campos más distantes de la Mecánica Cuántica, tales como la biología o mineralogía. También es interesante mencionar su uso en superconductividad, en átomos bajo el efecto de láseres, líquidos metálicos y propiedades magnéticas de aleaciones.
2. Aprender a utilizar el código de primeros principios SIESTA, basado en la teoría del funcional de la densidad y en funciones base localizadas (método LCAO, o "Linear Combination of Atomic Orbitals"). Más en concreto, el estudiante aprenderá a: generar pseudopotenciales y comprobar su transferibilidad; optimizar el conjunto base para converger el cálculo de la energía del sistema físico; optimizar la estructura de materiales como moléculas, agregados, superficies y sólidos; analizar la estructura electrónica tras la finalización del cálculo; obtener las frecuencias y densidad de estados vibracionales; hacer simulaciones de la evolución temporal del sistema; por último, y dependiendo del tiempo disponible, analizar otro tipo de propiedades como las ópticas, magnéticas, etc. Este objetivo se conseguirá estudiando casos concretos sencillos en el aula, y encargando casos algo más complicados a los alumnos como trabajo propio externo.
3. Conocer las principales características de los códigos de primeros principios basados en ondas planas (QUANTUM-ESPRESSO, ABINIT, VASP, ...) y aprender a utilizar el primero de ellos. Se considerarán los diversos tipos de pseudopotenciales que se utilizan con estos códigos (norm-conserving, ultrasoft, PAW). Se aprenderá a controlar los parámetros que determinan la convergencia de las propiedades físicas en estos tipos de cálculos (energías de corte, muestreo de la zona de Brillouin). Se realizarán estudios sencillos para moléculas y sólidos, así como cálculos más complejos para sistemas sólidos y líquidos.
4. Conocer el origen e historia del método de Monte Carlo (aguja de Buffon, Fermi, Von Neumann, Ulam y Metropolis). Conocer y entender los fundamentos del método de Monte Carlo y en particular el Monte Carlo-Metropolis. Conocer y entender el método de Monte Carlo-Metropolis aplicado a la simulación de los conjuntos canónico (número N de moléculas, volumen V y temperatura T constantes, NVT) y macrocanónico (potencial químico μ , volumen V y temperatura T constantes, μVT) de un gas. Aprender a usar un código de Monte Carlo-Metropolis aplicado a simulaciones NVT y μVT de un gas (hidrógeno, metano, N_2 , CO_2 , etc.) dentro de un material nanoporoso. Se harán simulaciones del conjunto macrocanónico de la capacidad de almacenamiento gravimétrico de hidrógeno a temperatura constante (isotermas de adsorción) de MOFs (Metal-Organic Frameworks) y de poros plano-paralelos de carbono. Se analizarán los resultados de las simulaciones y se interpretará el significado físico de los mismos.

4. Contenidos

1. Fundamentos de la teoría del funcional de la densidad (Density Functional Theory, DFT) (8 horas, clases teóricas en un aula del Aulario, David)
2. Cálculos DFT de las propiedades de materiales mediante métodos de bases localizadas: El código SIESTA (10 horas, prácticas de ordenador en el laboratorio de Informática, Andrés)
3. Cálculos DFT de las propiedades de materiales mediante métodos de bases deslocalizadas: Ondas planas (10 horas, prácticas de ordenador en el laboratorio de Informática, Luis Enrique)
4. Simulaciones de las propiedades de materiales mediante el método de Monte Carlo (10 horas, prácticas de ordenador en el laboratorio de Informática, Iván)



5. Métodos docentes y principios metodológicos

La teoría de esta asignatura se impartirá en clases magistrales. Las prácticas de ordenador, es decir, el uso de los programas o códigos de cálculo DFT y del método de Monte Carlo se harán en el laboratorio de Informática.





6. Tabla de dedicación del estudiante a la asignatura

ACTIVIDADES PRESENCIALES	HORAS	ACTIVIDADES NO PRESENCIALES	HORAS
Clases de teoría	8	Estudio de la teoría	10
Prácticas de ordenador	30	Cálculos y simulaciones en ordenador	27
Total presencial	38	Total no presencial	37

7. Sistema y características de la evaluación

INSTRUMENTO/PROCEDIMIENTO	PESO EN LA NOTA FINAL	OBSERVACIONES
Entrega y presentación oral de los resultados de un trabajo práctico de simulación.	50 %	Se entregará en formato pdf un breve informe de los resultados obtenidos y se presentarán oralmente.
Examen oral después de la presentación.	50 %	Se valorará la contestación a preguntas de los profesores tras la presentación realizada.

CRITERIOS DE CALIFICACIÓN

- **Convocatoria ordinaria:**
 - o Para aprobar esta asignatura hay que obtener una nota final mayor o igual que cinco.
- **Convocatoria extraordinaria:**
 - o Lo mismo que en el párrafo anterior.

8. Consideraciones finales