



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE MADRID

## 33425 - MÉTODOS TEÓRICOS PARA LA SIMULACIÓN DE MATERIALES

### Información de la asignatura

**Código - Nombre:** 33425 - MÉTODOS TEÓRICOS PARA LA SIMULACIÓN DE MATERIALES

**Titulación:** 748 - Máster Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelización Computacional  
762 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2021)

**Centro:** 104 - Facultad de Ciencias

**Curso Académico:** 2021/22

### 1. Detalles de la asignatura

#### 1.1. Materia

MÉTODOS TEÓRICOS PARA LA SIMULACIÓN DE MATERIALES

#### 1.2. Carácter

Optativa

#### 1.3. Nivel

Máster (MECES 3)

#### 1.4. Curso

2

#### 1.5. Semestre

Segundo semestre

#### 1.6. Número de créditos ECTS

6.0

#### 1.7. Idioma

Inglés

#### 1.8. Requisitos previos

No hay.

#### 1.9. Recomendaciones

No aplicable.

|                                       |  |                |            |     |
|---------------------------------------|--|----------------|------------|-----|
| <b>Código Seguro de Verificación:</b> |  | <b>Fecha:</b>  | 05/07/2021 | 1/4 |
| <b>Firmado por:</b>                   | <i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i> |                |            |     |
| <b>Url de Verificación:</b>           |  | <b>Página:</b> | 1/4        |     |

## 1.10. Requisitos mínimos de asistencia

La asistencia es obligatoria.

## 1.11. Coordinador/a de la asignatura

Manuel Alcamí Pertejo.

<https://autoservicio.uam.es/paginas-blancas/>

## 1.12. Competencias y resultados del aprendizaje

---

### 1.12.1. Competencias

#### BÁSICAS Y GENERALES

CG02 - Los estudiantes son capaces de resolver problemas y tomar decisiones de cualquier índole bajo el compromiso con la defensa y práctica de las políticas de igualdad.

CG03 - Los estudiantes son capaces de trabajar en equipo tanto a nivel multidisciplinar como con sus propios pares respetando el principio de igualdad de hombre y mujeres.

CB6 - Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación

CB7 - Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio

CB9 - Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades

CB10 - Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.

#### TRANSVERSALES

CT02 - El/la estudiante es organizado en el trabajo demostrando que sabe gestionar el tiempo y los recursos de que dispone.

CT04 - El/la estudiante tiene capacidad de generar nuevas ideas a partir de sus propias decisiones.

CT09 - Capacidad de obtener, seleccionar, elaborar y procesar información proveniente de fuentes diversas con criterios objetivos, priorizándolas según su calidad y pertinencia

CT10 - Predecir y controlar la evolución de situaciones complejas mediante el desarrollo de nuevas e innovadoras metodologías de trabajo adaptadas al ámbito científico/investigador y profesional

CT11 - Identificar y seleccionar con rigor la metodología adecuada para formular hipótesis, definir problemas y diseñar estrategias de trabajo propias de la investigación incidiendo en el compromiso ético

#### ESPECÍFICAS

CE01 - Los estudiantes demuestran su conocimiento y comprensión de los hechos aplicando conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química Teórica y Modelización Computacional.

CE02 - Amplia y/o adquiere conocimiento de los métodos básicos de la Química Cuántica y evalúa críticamente su aplicabilidad.

CE19 - El/la estudiante está familiarizado con las técnicas computacionales que, basadas en la mecánica y dinámica molecular, son la base del diseño de moléculas de interés en campos tales como farmacología, petroquímica, etc.

CE22 - Conoce la existencia de técnicas computacionales avanzadas tales como: canalización de instrucciones y datos, procesadores superescalar y multiescalares, operaciones en cadena, plataformas en paralelo, etc.

### 1.12.2. Resultados de aprendizaje

No aplica.

### 1.12.3. Objetivos de la asignatura

El curso se centrará en el uso de técnicas de química teórica para describir las propiedades de nuevos materiales. Incluirá aspectos como el modelado de sistemas periódicos, superficies, nanotubos, materiales 2D como frameworks metal-orgánicos (COF), deposito de moléculas en superficies, auto-ensamblado, etc. Este tipo de simulación se encuentra en la frontera de la física y la química y muchas veces requiere combinar diferentes métodos computacionales para describir tanto el material como la parte activa del mismo y diferentes efectos como la transferencias de electrones. El curso presentará ejemplos para mostrar cómo aplicar diferentes modelos y también incluirá aspectos como el diseño de materiales utilizando técnicas de machine learning.

## 1.13. Contenidos del programa

|                                       |  |                |            |            |
|---------------------------------------|--|----------------|------------|------------|
| <b>Código Seguro de Verificación:</b> |  | <b>Fecha:</b>  | 05/07/2021 | <b>2/4</b> |
| <b>Firmado por:</b>                   | <i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i> |                |            |            |
| <b>Url de Verificación:</b>           |  | <b>Página:</b> | 2/4        |            |

#### Bloque teórico

1. Nanomateriales: perspectiva desde la física y la química.
2. Teoría de sólidos.
3. Diseño de materiales específicos.
4. Semiconductores orgánicos para optoelectrónica.
5. Interfases organo-inorgánicas.
6. Grafeno y materiales 2D.
7. Funcionalización del grafeno y puntos de carbono.

#### Bloque práctico

1. VASP
2. Descubriendo y diseñando materiales de alto rendimiento.
3. Mecánica molecular/ Simulación dinámica de materiales moleculares.
4. Cálculos DFT no periódicos de materiales y superficies.

### 1.14. Referencias de consulta

- A Computational Chemistry of Solid State Materials. Ronald Hoffmann. Wiley-VCH.
- Electronic structure. Basic Theory and Practical Methods. Richard M. Martin.
- Fundamentals of Condensed Matter Physics. Marvin L. Cohen and Steven G. Louie.

## 2. Metodologías docentes y tiempo de trabajo del estudiante

---

### 2.1. Presencialidad

|  | #Horas |
|--|--------|
| Porcentaje de actividades presenciales (mínimo 33% del total). | 43     |
| Porcentaje de actividades no presenciales.                     | 82     |

### 2.2. Relación de actividades formativas

| Actividades presenciales          | Nº horas |
|-----------------------------------|----------|
| Clases teóricas en aula           | 20       |
| Prácticas con medios informáticos | 20       |
| Actividades de evaluación         | 3        |

## 3. Sistemas de evaluación y porcentaje en la calificación final

---

### 3.1. Convocatoria ordinaria

La nota final de la asignatura se basará en: 20% examen final de la asignatura y un 80% correspondiente a la entrega de un informe de ejercicios propuestos por el profesor.

#### 3.1.1. Relación actividades de evaluación

| Actividad de evaluación | %  |
|-------------------------|----|
| Examen final            | 20 |
| Ejercicios propuestos   | 80 |

|                                       |  |                |            |            |
|---------------------------------------|--|----------------|------------|------------|
| <b>Código Seguro de Verificación:</b> |  | <b>Fecha:</b>  | 05/07/2021 | <b>3/4</b> |
| <b>Firmado por:</b>                   | <i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i> |                |            |            |
| <b>Url de Verificación:</b>           |  | <b>Página:</b> | 3/4        |            |

### 3.2. Convocatoria extraordinaria

La evaluación se basará en la entrega de un informe con los ejercicios propuestos.

#### 3.2.1. Relación actividades de evaluación

| Actividad de evaluación | %   |
|-------------------------|-----|
| Ejercicios propuestos.  | 100 |
| Evaluación continua     | 0   |

### 4. Cronograma orientativo

La asignatura está organizada por la Universidad Autónoma de Madrid.

|                                       |  |                |            |            |
|---------------------------------------|--|----------------|------------|------------|
| <b>Código Seguro de Verificación:</b> |  | <b>Fecha:</b>  | 05/07/2021 | <b>4/4</b> |
| <b>Firmado por:</b>                   | <i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i> |                |            |            |
| <b>Url de Verificación:</b>           |  | <b>Página:</b> | 4/4        |            |