

**FICHA IDENTIFICATIVA****Datos de la Asignatura**

Código	44987
Nombre	Métodos teóricos para la simulación de materiales
Ciclo	Máster
Créditos ECTS	6.0
Curso académico	2022 - 2023

Titulación(es)

Titulación	Centro	Curso	Periodo
2245 - M.ErasmMund en Química Teórica y Modelización Computacional	Facultad de Química	2	Anual

Materias

Titulación	Materia	Caracter
2245 - M.ErasmMund en Química Teórica y Modelización Computacional	4 - Optativas de segundo	Optativa

Coordinación

Nombre	Departamento
TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO	315 - Química Física

RESUMEN

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.



CONOCIMIENTOS PREVIOS

Relación con otras asignaturas de la misma titulación

No se han especificado restricciones de matrícula con otras asignaturas del plan de estudios.

Otros tipos de requisitos

COMPETENCIAS

2245 - M.ErasmMund en Química Teórica y Modelización Computacional

- Que los/las 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.
- Que los/las 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.
- Que los/las estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo
- 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.
- El estudiante demuestra su conocimiento y comprensión de los hechos aplicando conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química Teórica y Modelización Computacional.
- Ampliar y/o adquirir conocimiento de los métodos básicos de la Química Cuántica y evaluar críticamente su aplicabilidad.
- El 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.
- Conocer la existencia de técnicas computacionales avanzadas tales como: canalización de instrucciones y datos, procesadores superescalar y multiescalares, operaciones en cadena, plataformas en paralelo, etc.
- 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.
- 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.
- El/la estudiante es organizado en el trabajo demostrando que sabe gestionar el tiempo y los recursos de que dispone.



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

RESULTADOS DE APRENDIZAJE

DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS

1. 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.

2. 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.

VOLUMEN DE TRABAJO

ACTIVIDAD	Horas	% Presencial
Prácticas en aula informática	20,00	100
Clases de teoría	20,00	100
Tutorías regladas	5,00	100
TOTAL	45,00	

METODOLOGÍA DOCENTE

EVALUACIÓN

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.

Convocatoria extraordinaria

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

REFERENCIAS

Básicas

- 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.