

GUÍA DOCENTE

SIMULACION EN SISTEMAS NANOMETRICOS

GRADO EN NANOCIENCIA Y NANOTECNOLOGIA

CURSO 2024-25

Fecha de publicación: 09-07-2024

I.-Identificación de la Asignatura	
Tipo	OBLIGATORIA
Período de impartición	3 curso, 2Q semestre
Nº de créditos	3
Idioma en el que se imparte	Castellano

II.-Presentación
<p>El estudiantado explorará los potenciales interatómicos e intermoleculares que rigen las interacciones a escala nanométrica. Se aprenderá sobre la descripción de los colectivos termodinámicos. Se profundizará en las técnicas de simulación que se aplican a los diferentes métodos de simulación molecular. El estudiantado se familiarizará con el método de simulación de Monte Carlo, que utilizan muestreos aleatorios para obtener resultados numéricos y con el método de Dinámica Molecular, basado en la resolución de las ecuaciones de movimiento clásicas, para simular el comportamiento de moléculas y átomos. Se estudiará cómo las técnicas de simulación se aplican al estudio de superficies y nanosistemas. Toda esta visión se concentra en el aprendizaje de la simulación molecular de multiescalar. Este curso proporcionará una base sólida en simulación molecular, preparándote para futuras investigaciones en nanociencia y nanotecnología.</p> <p>Se recomienda que el alumno tenga conocimientos previos en informática, matemáticas y física. Con el objetivo de concienciar a la población y, en este caso, a los estudiantes de la Universidad Rey Juan Carlos que estudian en el grado de Nanociencia y Nanotecnología esta asignatura, se irán implementando de manera gradual y con ejemplos específicos en función de la temática abordada, aquellos Objetivos de Desarrollo Sostenible (ODS) que la Organización Mundial de la Salud (OMS) ha establecido como objetivos fundamentales a conseguir en 2030. En este contexto, en la asignatura de Simulación en sistemas nanométricos, se introducirán los siguientes Objetivos de Desarrollo Sostenible: Educación de Calidad (ODS4) e igualdad de Género (ODS5) durante la asignatura.</p>

III.-Resultados de Aprendizaje
<p>CG03. Capacidad de aplicar esos conocimientos e información a la resolución de problemas complejos y multidimensionales en el desarrollo de la actividad profesional, organizando, planificando y decidiendo en tareas, tanto individuales como en equipo, relacionadas con los objetivos de logro y calidad y dentro del compromiso ético</p> <p>CG05. Capacidad de desarrollar las habilidades de aprendizaje necesarias para abordar nuevos problemas y adaptarse a diferentes escenarios, y emprender estudios posteriores con un alto grado de autonomía.</p> <p>CE03. Utilizar la programación de ordenadores, sistemas operativos, bases de datos, programas informáticos de uso general y herramientas de cálculo específicas para el modelado y simulación de sistemas de interés en Nanociencia y Nanotecnología.</p>



IV.-Contenido

IV.A.-Temario de la asignatura

- TEMA 1: Fundamentos de la simulación en sistemas nanométricos:
- Introducción a la modelización de sistemas nanométricos: Interacciones moleculares.
- Potenciales intra e intermoleculares.
- TEMA 2: Herramientas para la simulación de sistemas nanométricos.
- Microestados de los sistemas moleculares: Colectivos.
- Algoritmos de simulación molecular.
- Simplificaciones y correcciones de los potenciales.
- Condiciones de Contorno Periódico. Lista de vecinos.
- TEMA 3: Técnicas de simulación I: Método Monte Carlo.
- Cálculo de propiedades a partir de la función de partida.
- Cadenas de Markov. Algoritmo de Metrópolis-Hastings.
- TEMA 4: Técnicas de simulación II: Método de dinámica molecular.
- Soluciones para las ecuaciones de Newton: algoritmos para la integración numérica.
- Etapas de una simulación de dinámica molecular.
- TEMA 5: Aplicaciones de dinámica molecular en sólidos y superficies.
- Principales potenciales atómicos empleados en sólidos.
- Minimización de la energía potencial y equilibrado de un sistema.
- Determinación de las propiedades mecánicas de sólidos.
- Simulación del contacto entre superficies de sólidos.

IV.B.-Actividades formativas

Tipo	Descripción
Asistencia a clases teóricas	Actividad presencial. El alumno dispondrá de las diapositivas presentadas en el aula virtual.
Laboratorios experimentales y/o tecnológicos	Resolución de casos prácticos por parte de los alumnos utilizando diferentes herramientas informáticas
Resolución de ejercicios, problemas, casos	Resolución de casos prácticos por parte del profesor utilizando diferentes herramientas informáticas
Realización de pruebas	Realización del examen global de la asignatura.
Otras actividades	A lo largo del curso se llevarán a cabo tutorías grupales o individuales para trabajar y reforzar contenidos.



V.-Tiempo de Trabajo del estudiante (30h grado y 25h máster)	
Clases teóricas	12
Clases de resolución de ejercicios, problemas, casos, etc.	7
Prácticas en laboratorios experimentales, tecnológicos, clínicos, campo, etc.	8
Realización de pruebas	3
Tutorías académicas	20
Actividades relacionadas: jornadas, seminarios, etc.	4
Preparación de clases teóricas	30
Preparación de prácticas/ejercicios/casos	3
Preparación de pruebas	3
Total de horas de trabajo del alumnado	90

VI.-Metodología y plan de trabajo		
Tipo	Periodo	Contenido
Clases Teóricas	Semana 1 a Semana 16	Actividad presencial. El alumno dispondrá de las diapositivas presentadas en el aula virtual.
Laboratorios experimentales y/o tecnológicos	Semana 3 a Semana 16	Resolución de casos prácticos por parte de los alumnos con diferentes herramientas informáticas utilizando las herramientas disponibles en la universidad y posterior entrega de trabajos
Resolución de ejercicios, problemas, casos	Semana 1 a Semana 16	Resolución de casos prácticos por parte del profesor utilizando diferentes herramientas informáticas
Tutorías académicas	Semana 1 a Semana 16	A lo largo del curso se llevarán a cabo tutorías grupales o individuales para trabajar y reforzar contenidos.
Pruebas	Semana 17 a Semana 17	Realización del examen global de la asignatura

VII.-Método de evaluación

El modelo de evaluación general es la evaluación continua, tal como establece el Reglamento de evaluación de los resultados de aprendizaje de la Universidad Rey Juan Carlos.

Deberán utilizarse todos los sistemas de evaluación establecidos para la asignatura en la memoria de la titulación, excepto aquellos que tuviesen una ponderación mínima del 0%, que podrán utilizarse en los cursos académicos en los que el profesorado lo considere oportuno. Cada uno de los sistemas de evaluación podrá ser aplicado mediante una o más actividades de evaluación, coherentes con ese sistema. Ninguna de las actividades de evaluación podrá superar individualmente el 60% de la calificación global de la asignatura.

La suma de las actividades de evaluación no revaluables no podrá superar el 40% de la calificación global de la asignatura y, en general, no deberían tener nota mínima (salvo en el caso de actividades de carácter práctico en las que, estrictamente, no pudieran reproducirse en la convocatoria extraordinaria las condiciones de evaluación de la convocatoria ordinaria).

Los estudiantes que no consigan superar la asignatura en la convocatoria ordinaria, o no se hayan presentado, podrán presentarse a la convocatoria extraordinaria únicamente a las actividades de evaluación revaluables no superadas.

La distribución y características de las actividades de evaluación son las que se describen a continuación.

VII.A.- Descripción de las pruebas de evaluación y su ponderación

30% Prueba escrita 1. NOTA MÍNIMA: 5. REEVALUABLE en convocatoria extraordinaria de junio. El examen se realizará presencialmente e incluirá los contenidos desarrollados en los temas 1 a 3. Esta prueba se realizará de forma presencial en la fecha establecida por los profesores de la asignatura.

30% Prueba escrita 2. NOTA MÍNIMA: 5. REEVALUABLE en convocatoria extraordinaria de junio. El examen se realizará presencialmente e incluirá los contenidos desarrollados en los temas 4 a 5. Esta prueba se realizará de forma presencial en la fecha de la convocatoria ordinaria de enero.

20% Resolución de problemas y casos prácticos. NOTA MINIMA: NO. NO REEVALUABLE ACUMULABLE. La entrega de trabajos prácticos se realizará utilizando las herramientas disponibles en la universidad durante todo el periodo de la asignatura. Estos seminarios, dedicados a la resolución de problemas para ser evaluados, se realizarán de forma presencial en la fecha establecida.

20% Ejecución y resolución de casos de laboratorio. NOTA MINIMA: NO. NO REEVALUABLE ACUMULABLE. La entrega de un informe con los resultados de un caso práctico. Utilizando las herramientas disponibles en la universidad durante todo el periodo de la asignatura.

Es imprescindible obtener una calificación mínima de 5 puntos (en una escala de 0 a 10) en las pruebas escritas parciales para superar la asignatura; es decir, el resto de las actividades evaluadoras sólo se incorporan a la calificación definitiva cuando este requisito se haya satisfecho. La asignatura se considera superada si la calificación final de la convocatoria ordinaria es mayor o igual que 5 sobre 10.

El estudiante que haya solicitado la convocatoria adelantada deberá ponerse en contacto con el profesor responsable de la asignatura tan pronto sea posible para que le facilite la información y/o material necesario para la evaluación que será similar a la que seguirá el resto de estudiantes matriculados en la asignatura.

VII.B.- Evaluación de estudiantes con dispensa académica de asistencia a clase

La concesión de Dispensa Académica de Asistencia a Clase (DAAC no implica que el estudiante quede automáticamente eximido de participar en las actividades de evaluación continua ni en las actividades formativas presenciales de asistencia obligatoria establecidas en la guía docente. Una vez concedida la dispensa, el estudiante deberá contactar con el docente, que podría proponerle las adaptaciones que considere convenientes, siempre que garanticen la adquisición y adecuada evaluación de los resultados de aprendizaje previstos. El estudiante deberá mantener a lo largo de curso una comunicación fluida con el docente para que este le proporcione información sobre las fechas en que se realizarán esas actividades formativas y de evaluación, en caso de que su programación no estuviese ya fijada y a disposición de los estudiantes en el momento de la concesión de la dispensa.

Asignatura con posibilidad de dispensa: Si

VII.C.- Revisión de las pruebas de evaluación

Se realizará conforme al Reglamento de evaluación de los resultados de aprendizaje de la Universidad Rey Juan Carlos.



VII.D.- Estudiantes con discapacidad o necesidades educativas especiales

A fin de garantizar la igualdad de oportunidades, la no discriminación, la accesibilidad universal y la mayor garantía de éxito académico, los y las estudiantes con discapacidad o con necesidades educativas especiales podrán solicitar adaptaciones curriculares para el seguimiento de sus estudios. Esas adaptaciones serán pautadas por la Unidad de Atención a Personas con Discapacidad de la Universidad Rey Juan Carlos, de acuerdo con la normativa que regula el servicio de Atención a Estudiantes con Discapacidad de la Universidad.

Dicha Unidad emitirá un informe de adaptaciones curriculares, por lo que los y las estudiantes con discapacidad o necesidades educativas especiales deberán contactar con la Unidad (discapacidad.programa@urjc.es), a fin de analizar conjuntamente las distintas alternativas.

VII.E.- Conducta académica, integridad y honestidad académica

La Universidad Rey Juan Carlos está plenamente comprometida con los más altos estándares de integridad y honestidad académica, por lo que estudiar en la URJC supone asumir y suscribir los valores de integridad y la honestidad académica recogidos en el Código Ético de la Universidad (<https://www.urjc.es/codigoetico>).

Para acompañar este proceso, la Universidad dispone de la Normativa de Convivencia de la Universidad Rey Juan Carlos (<https://www.urjc.es/images/Universidad/Presentacion/normativa/normativa%20convivencia%20universitaria.pdf>) y de diferentes herramientas (antiplagio, supervisión) que ofrecen una garantía colectiva para el completo desarrollo de estos valores esenciales.



VIII.-Recursos y materiales didácticos

Bibliografía básica

Understanding Molecular Simulation (Third Edition), Daan Frenkel, Berend Smit, Ed. Academic Press, 2023, ISBN 9780323902922.

Computational Materials Science: An Introduction (Second Edition). June Gunn Lee. CRC Press. ISBN 9781498749732

A Practical Introduction to the Simulation of Molecular Systems. (Second Edition). Martin J. Field. Cambridge University Press. ISBN 9780511619076

Bibliografía complementaria

IX.-Profesorado

Nombre y apellidos	ANGEL DE LA ROSA VELASCO
Correo electrónico	angel.delarosa@urjc.es
Departamento	Tecnología Química, Energética y Mecánica
Categoría	Profesor/a Ayudante Doctor/a
Titulación académica	Doctor
Responsable de asignatura	No
Horario de Tutorías	Para consultar las tutorías póngase en contacto con el/la profesor/a a través de correo electrónico
Nº de Quinquenios	0
Nº de Sexenios	0
Nº de Sexenios de transferencia	0
Nº de evaluaciones positivas Docencia	0
Nombre y apellidos	ADRIAN DANTE BOCCARDO MATTUS
Correo electrónico	adrian.boccardo@urjc.es
Departamento	Tecnología Química, Energética y Mecánica
Categoría	Profesor/a Ayudante Doctor/a
Titulación académica	Doctor
Responsable de asignatura	No
Horario de Tutorías	Para consultar las tutorías póngase en contacto con el/la profesor/a a través de correo electrónico



Nº de Quinquenios	0
Nº de Sexenios	0
Nº de Sexenios de transferencia	0
Nº de evaluaciones positivas Docencia	0