

**Master Universitario de Nanomateriales Funcionales: Aplicaciones en  
Energía, Biotecnología y Medio Ambiente**

Título oficial regulado por Real Decreto 1393/2007, de 29 de octubre

Guía docente de la asignatura

<b>Módulo:</b>	CARACTERIZACIÓN DE NANOMATERIALES		
<b>Asignatura:</b>	TÉCNICAS DE MODELIZACIÓN COMPUTACIONAL DE NANOMATERIALES		
<b>Código:</b>	2202006	<b>Carácter (obligatoria / optativa):</b>	OBLIGATORIA
<b>Lenguas en las que se imparte</b>	<b>Total de créditos ECTS:</b>		4
ESPAÑOL	<b>% docencia en [indicar lengua L2]:</b>		%
	<b>% docencia en [indicar lengua L3]:</b>		%
	<b>Ubicación temporal</b>		1 semestre

Profesor/a responsable	e-mail	Despacho
SAID HAMAD GÓMEZ	said@upo.es	22.3.15

Actividades formativas	Horas	% presencial	% teoría	% práctica
CLASE MAGISTRAL EN AULA	22	100	100	
CLASE PRÁCTICA EN AULA (clases de problemas)	8	100		100
TRABAJO AUTÓNOMO DEL ESTUDIANTE	70	0	50	50

Profesor/a responsable	e-mail	Despacho
ÁNGEL RABDEL RUIZ SALVADOR	rruisal@upo.es	22.2.09
PATRICK J. M. MERKLING	pjmerx@upo.es	22.3.11
SOFÍA CALERO DÍAZ	S.Calero@tue.nl	
JUAN JOSÉ GUTIÉRREZ SEVILLANO	jjgutierrez@upo.es	47.2.29
ANA MARTÍN CALVO	amarcal@upo.es	47.2.29
SALVADOR RODRÍGUEZ GÓMEZ	salrodgom@upo.es	22.3.15

**Descripción general y justificación de la relevancia de la asignatura**

En esta asignatura se estudian los conceptos fundamentales de las técnicas de modelización de materiales más importantes hoy día. Por una parte, se estudian los diferentes tipos de cálculo de energías de sistemas nanoestructurados (cálculos clásicos y cuánticos) y por otra se estudian las diversas maneras de utilizar dichas energías para moverse por los espacios de fases de los sistemas (minimización de energía, dinámica molecular, Monte Carlo, etc.). Además, se pone énfasis en cómo las técnicas de aprendizaje automático permiten acelerar los procesos de modelización de nanomateriales. Para poder tener una idea global de los métodos de simulación, se llevará a cabo la aplicación de las técnicas vistas en teoría, en cuatro clases prácticas, que permitirán comprender mejor todos los conceptos.

Se permite la verificación de la integridad de una copia de este documento electrónico en la dirección: <a href="https://portafirmas.upo.es/verificarfirma/">https://portafirmas.upo.es/verificarfirma/</a> . Este documento incorpora firma electrónica reconocida o cualificada de acuerdo al Reglamento (UE) N° 910/2014 del Parlamento Europeo y del Consejo, de 23 de julio de 2014, relativo a la identificación electrónica y los servicios de confianza para las transacciones electrónicas en el mercado interior.			
FIRMADO POR	Universidad Pablo de Olavide	FECHA	30/10/2023
ID. FIRMA	firma.upo.es	92JMi/MNcAbSf+zx7uQRFDJLYdAU3n8j	PÁGINA
			1/4



# Master Universitario de Nanomateriales Funcionales: Aplicaciones en Energía, Biotecnología y Medio Ambiente

Título oficial regulado por Real Decreto 1393/2007, de 29 de octubre

## Competencias.

### Competencias básicas, transversales y generales del Máster que se desarrollan en la asignatura

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

### Competencias específicas y resultados de aprendizaje de la asignatura

#### CONOCIMIENTOS:

C1.1. Domina los métodos de cálculo de la energía de formación de nanomateriales.

C1.2. Domina los métodos de cálculo de la energía de interacción entre nanomateriales y otros sistemas moleculares.

C1.3. Domina los métodos de cálculo de la estructura de nanomateriales y propiedades relacionadas.

C1.4. Domina los principios fundamentales que rigen el comportamiento electrónico, óptico y magnético de nanomateriales.

C1.5. Conoce métodos de aprendizaje automático aplicados a nanomateriales.

#### HABILIDADES:

H1.1 Aplica métodos de mecánica clásica para modelar propiedades estructurales y de adsorción de nanomateriales.

H1.2 Aplica métodos de mecano-cuánticos para modelar propiedades estructurales, electrónicas, ópticas y magnéticas de nanomateriales.

H1.3 Posee una visión general de la modelización como herramienta para explicar resultados experimentales complejos, así como el diseño de nanomateriales.

H1.4 Identifica las tendencias globales actuales de investigación de modelización de nanomateriales, con una idea clara de la evolución de los métodos de modelización de nanomateriales.

H1.5 Desarrolla experiencias prácticas en la modelización de nanomateriales.

#### COMPETENCIAS:


COM1.1 Demostrar que comprende los aspectos más relevantes relacionados con el uso de la modelización en el campo de la Nanociencia y Nanotecnología.

COM1.2 Capacidad de proponer métodos para la modelización de nanomateriales que se ajusten a la problemática científica a abordar.

COM1.3 Capacidad para interpretar resultados de modelización de nanomateriales e integrarlos con resultados experimentales.

Se permite la verificación de la integridad de una copia de este documento electrónico en la dirección: <https://portafirmas.upo.es/verificarfirma/>. Este documento incorpora firma electrónica reconocida o cualificada de acuerdo al Reglamento (UE) N° 910/2014 del Parlamento Europeo y del Consejo, de 23 de julio de 2014, relativo a la identificación electrónica y los servicios de confianza para las transacciones electrónicas en el mercado interior.

FIRMADO POR	Universidad Pablo de Olavide	FECHA	30/10/2023	
ID. FIRMA	firma.upo.es	92JMi/MNcAbSf+zx7uQRFDJLYdAU3n8j	PÁGINA	2/4



# Master Universitario de Nanomateriales Funcionales: Aplicaciones en Energía, Biotecnología y Medio Ambiente

Título oficial regulado por Real Decreto 1393/2007, de 29 de octubre

## Contenidos

- Bloque 1 (8 h) Métodos de cálculo de energía: Potenciales interatómicos, métodos basados en función de onda, métodos basados en la densidad electrónica.
- Bloque 2 (6 h) Métodos de modelización de la estructura atómica y propiedades afines. Minimización local y global de energía, dinámica molecular y Monte Carlo.
- Bloque 3 (5 h) Modelización de propiedades electrónicas, ópticas y magnéticas.
- Bloque 3 (3 h): Métodos de aprendizaje automático.
- Práctica 1 (2 h): Obtención de estructuras de nanopartículas.
- Practica 2 (2 h): Adsorción y difusión en materiales nanoporosos.
- Practica 3 (2 h): Predicción de energías de enlace y bandgaps mediante aprendizaje automático.
- Practica 4 (2 h): Predicción de espectros UV de sistemas moleculares.

## Metodología de enseñanza

Esta asignatura combina clases teóricas y prácticas con un total de 30 horas, repartidas en: a) 22 horas de clases magistrales en las que se trabajarán simultáneamente casos prácticos de carácter presencial y b) 8 horas de prácticas (4 sesiones de prácticas de 2 h de duración cada una), en las que se desarrollarán de forma práctica los conocimientos y habilidades que se trabajan en las clases magistrales.


Se compartirá material en forma de diapositivas y notas de contenidos que sirvan tanto para la realización exitosa de la asignatura como para la preparación del resto de asignaturas del máster.

## Sistema de evaluación (ponderación mínima y máxima)

La evaluación de la asignatura se llevará a teniendo en cuenta dos tipos de evaluaciones: a) cuatro informes de prácticas, que se entregarán la semana siguiente de la realización de cada práctica; b) examen final de la asignatura, que se realizará al finalizar la misma.

## Bibliografía obligatoria

No hay.

Se permite la verificación de la integridad de una copia de este documento electrónico en la dirección: <a href="https://portafirmas.upo.es/verificarfirma/">https://portafirmas.upo.es/verificarfirma/</a> . Este documento incorpora firma electrónica reconocida o cualificada de acuerdo al Reglamento (UE) N° 910/2014 del Parlamento Europeo y del Consejo, de 23 de julio de 2014, relativo a la identificación electrónica y los servicios de confianza para las transacciones electrónicas en el mercado interior.			
FIRMADO POR	Universidad Pablo de Olavide	FECHA	30/10/2023
ID. FIRMA	firma.upo.es	92JMi/MNcAbSf+zx7uQRFDJLYdAU3n8j	PÁGINA 3/4
			

**Master Universitario de Nanomateriales Funcionales: Aplicaciones en  
Energía, Biotecnología y Medio Ambiente**

**Título oficial regulado por Real Decreto 1393/2007, de 29 de octubre**

**Bibliografía recomendada**

1. *Quantum Chemistry*. Ira N. Levine. Pearson. 2013.
2. *Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications*. Daan Frenkel y Berend Smit Elsevier. 2023
3. *Computer Simulation of Liquids*. Michael P. Allen and Dominic J. Tildesley. OUP Oxford. 2017
4. *Hands-On Machine Learning with Scikit-Learn and TensorFlow*. Aurelien Geron. O'Reilly Media. 2017

**Observaciones**

Se permite la verificación de la integridad de una copia de este documento electrónico en la dirección: <https://portafirmas.upo.es/verificarfirma/>. Este documento incorpora firma electrónica reconocida o cualificada de acuerdo al Reglamento (UE) N° 910/2014 del Parlamento Europeo y del Consejo, de 23 de julio de 2014, relativo a la identificación electrónica y los servicios de confianza para las transacciones electrónicas en el mercado interior.

FIRMADO POR	Universidad Pablo de Olavide	FECHA	30/10/2023
ID. FIRMA	firma.upo.es	92JMi/MNcAbSf+zx7uQRFDJLYdAU3n8j	PÁGINA 4/4
