



Asignatura: Métodos Computacionales en Física de la Materia Condensada.
Código: 30602
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Física de la Materia Condensada y Nanotecnología
Nivel: Máster
Tipo: Asignatura Optativa
Nº de créditos: 4 ECTS

ASIGNATURA / **COURSE TITLE**

Métodos Computacionales en Física de la Materia Condensada. / **Computational Methods in Condensed Matter Physics.**

1.1. Código / **Course number**

30602

1.2. Materia / **Content area**

Temas avanzados de física de la materia condensada y de nanotecnología/
Advanced topics on Condensed Matter Physics and Nanotechnology

1.3. Tipo / **Course type**

Formación optativa / **Elective subject**

1.4. Nivel / **Course level**

Máster / **Master (second cycle)**

1.5. Curso / **Year**

1º / **1st**

1.6. Semestre / **Semester**

2º trimestre / **2nd trimester**

1.7. Número de créditos / **Credit allotment**

4 créditos ECTS / **4 ECTS credits**



Asignatura: Métodos Computacionales en Física de la Materia Condensada.
Código: 30602
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Física de la Materia Condensada y Nanotecnología
Nivel: Máster
Tipo: Asignatura Optativa
Nº de créditos: 4 ECTS

1.8. Requisitos previos / Prerequisites

Disponer de un nivel de inglés que permita al alumno manejar la bibliografía de consulta / [Students must have a suitable level of English to read references in the language.](#)

Esta asignatura esta muy directamente relacionada con las asignaturas obligatorias Calculo Numérico y Computacional y con Física Estadística Avanzada pertenecientes al modulo (M1). Tambien se relaciona directamente con las asignaturas optativa Física Estadística de Líquidos y Sistemas Complejos y Teoría Cuántica Avanzada de la Materia Condensada del modulo (M2). /

[This course is directly related with the compulsory courses Advanced Statistical Physics and Numerical and Computational Calculus in module \(M1\). It is also related with the elective course Statistical Physics of Liquids and Complex Systems and Advanced Quantum Theory of Condensed Matter Physics of module \(M2\).](#)

1.9. Requisitos mínimos de asistencia a las sesiones presenciales / Minimum attendance requirement

La asistencia es obligatoria, cualquier falta de asistencia deberá ser justificada/ [Attendance is mandatory, any absence has to be justified.](#)

1.10. Datos del equipo docente / Faculty data

Docente(s) / [Lecturer\(s\)](#) (Coordinador)

Juan José Palacios Burgos

Departamento de / [Department of](#)

Física de la Materia Condensada

Facultad / [Faculty](#)

Ciencias

Despacho - Módulo / [Office - Module](#)

Modulo 3 509

Teléfono / [Phone](#): +34 91 497 3667

Correo electrónico/[Email](#): juanjose.palacios@uam.es

Página web/[Website](#):

Horario de atención al alumnado/[Office hours](#):

L & X 13:00-14:00/ [M & W 13:00-14:00](#)



Asignatura: Métodos Computacionales en Física de la Materia Condensada.
Código: 30602
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Física de la Materia Condensada y Nanotecnología
Nivel: Máster
Tipo: Asignatura Optativa
Nº de créditos: 4 ECTS

1.11. Objetivos del curso / Course objectives

Esta asignatura, como otras encuadradas en el módulo (M2) del Master en física de la Materia Condensada y Nanotecnología, tiene un carácter avanzado y práctico.

Comparte con estas asignaturas el objetivo de desarrollo de las siguientes competencias generales detalladas en la Memoria del Master FMCyN aprobado por la ANECA:

1. Conocer las herramientas básicas de simulación por computador en los diversos campos de la materia condensada (tanto en su descripción clásica como cuántica). / [To know the basic tools of computer simulation in different fields of condensed matter physics.](#)
2. Tener conocimientos básico de usuario de diversos paquetes de cálculo estándar. / [To have a basic knowledge of standard calculation packages.](#)
3. Ser capaz de programar herramientas básicas de análisis de medidas de simulación (como correlaciones, funciones de distribución, etc.). / [To know how to program basic simulations tools.](#)
4. Conocer los detalles básicos de los códigos de dinámica molecular y Monte Carlo, y ser capaz de programarlos. / [To know the details of MD and MC codes and to be able to write codes based on those algorithm.](#)
5. Analizar los resultados de simulaciones a tenor de la base física teórica de cada fenómeno estudiado. / [Analyze the simulation results on the basis of the theoretical physics behind them.](#)
6. Ser capaz de estimar la cantidad de computación necesaria para resolver un problema físico, con un margen de error dado, a tenor del comportamiento estadístico del sistema tratado. / [To be able to estimate the amount of computing time necessary to solve a physical problem with a a given error bar.](#)
7. Ser prolijo a la hora de organizar y planificar la redacción de un código de simulación, así como en el ordenamiento de los resultados. / [know how to organize, program and write a documentation of a code and present results of simulations.](#)
8. Estar familiarizado con la programación en paralelo. [To be familiar with parallel programming](#)



Asignatura: Métodos Computacionales en Física de la Materia Condensada.
Código: 30602
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Física de la Materia Condensada y Nanotecnología
Nivel: Máster
Tipo: Asignatura Optativa
Nº de créditos: 4 ECTS

1.12. Contenidos del programa / Course contents

1. Introducción: particularidades de los métodos computacionales en materia condensada.
2. Método de Monte Carlo: metodología y aplicaciones (modelo de red, cadena polimérica, coloides).
3. Método de Dinámica Molecular: metodología, cálculo de propiedades de equilibrio y aplicaciones (fluido simple, potenciales discontinuos), técnicas de optimización de códigos, cálculo de propiedades dinámicas. Dinámica de Langevin: aplicaciones a líquidos polímeros y suspensiones coloidales.
4. Método de Monte Carlo Cuántico y aplicaciones (modelos en red, resolventes de impurezas).
5. Potenciales de interacción clásicos: fundamentos.
6. Métodos de cálculo de estructura electrónica en sólidos.
 1. Parametrización "tight-binding".
 2. Teoría del Funcional de la Densidad (teorema de Hohenberg-Kohn, ecuaciones de Kohn-Sham, funcional de intercambio y correlación, familiarización con el uso de códigos basados en orbitales localizados).
7. Transporte electrónico cuántico. Teoría y métodos de cálculo.

1. Introduction: specific features of computational methods in condensed matter physics.
2. Classical Monte Carlo Methods: Methodology and applications (lattice models, polymeric chain).
3. Molecular Dynamics : Methodology, equilibrium properties computation and applications (Simple fluids, Discontinuous potential.) Code Optimization Dynamical properties. Langevin Dynamics. Applications to polymeric liquids.
4. Quantum Monte Carlo Methods. Applications (Lattice Models, Impurity Solvers)
5. Classical Potentials.
6. Methods of electronic structure calculations in solids:
 1. Tight-binding parametrization.
 2. Density Functional Theory (Hohenberg-Kohn theorem, Kohn-Sham equations, exchange and correlation potential, use of codes based on localized orbital basis sets.)
7. Electronic quantum transport: Theory and computational methods.

1.13. Referencias de consulta / Course bibliography

RECURSOS EN LA WEB

La mayor parte del material de trabajo práctico (códigos, ejercicios), así como apuntes teóricos están colgados en la página web de la asignatura, que puede encontrarse a partir de la página del master:

<http://www.uam.es/fmcyn/>

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA / BASIC BIBLIOGRAPHY:

- 1.) Applications of the Monte Carlo method in Statistical Physics (Springer,



Asignatura: Métodos Computacionales en Física de la Materia Condensada.
Código: 30602
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Física de la Materia Condensada y Nanotecnología
Nivel: Máster
Tipo: Asignatura Optativa
Nº de créditos: 4 ECTS

1984)

2.) Computer simulation of liquids (Allen y Tildesley, Oxford, 1987)

3.) Understanding Molecular Simulation (Frenkel y Smit, Academic Press, 1996)

4.) Observation, Prediction and simulation of phase transitions in complex fluid (Kluwer Academic, 1995)

5.) Physical Review vol. 159, 98 (1967), L. Verlet

6.) Monte Carlo Simulations in Statistical Physics (Binder y Heermann, Springer 2010)

7.) A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics (Landau y Binder, Cambridge 2009)

8.) Bonding and Structure of molecules and solids, (Pettifor, Oxford 1995)

9.) Interatomic Potentials for Atomic Simulations, (A. F. Voter y otros MRS Bulletin 21 (1996) 17-48)

10.) Computational Chemistry, (G. H. Grant y W. G. Richards Oxford U. P. 1995)

11.) Quantum transport: Atom to transistor (S. Datta, Cambridge University Press, Cambridge 2005).

2. Métodos docentes / Teaching methodology

1. **Clases teóricas/Theoretical Classes:** exposición oral por parte de los profesores de los contenidos teóricos fundamentales de cada tema. En las sesiones se utilizarán transparencias que estarán disponibles en la página correspondiente de docencia en red, indicada por el profesor a principio de curso. /[The course slides will be available in the teachers web page](#)

2. **Clases prácticas/Practical Classes and workshops:** La asignatura de Métodos de Computación en Física de la Materia Condensada es una asignatura esencialmente práctica. El núcleo de la docencia presencial está formada por talleres de resolución de problemas prácticos por parte de los estudiantes que estarán supervisados por el profesor. Los talleres se realizarán en las aulas informáticas de la Facultad de Ciencias. En estos talleres se realizarán ejercicios de programación y simulación en cada una de



Asignatura: Métodos Computacionales en Física de la Materia Condensada.
Código: 30602
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Física de la Materia Condensada y Nanotecnología
Nivel: Máster
Tipo: Asignatura Optativa
Nº de créditos: 4 ECTS

las áreas del programa./The main part of the teaching will be a simulational workshop at the computer classrooms of the Science Building.

3. **Estudio personal/Personal study:** Se define como aprendizaje autónomo académicamente dirigido por el profesor a través de las tareas publicadas en la página de docencia en red. Este trabajo constituye una continuación de los problemas iniciados en los talleres realizados en las aulas informáticas. Muchos de los ejercicios requieren cálculo de computador, así una parte relevante del estudio personal será poner a punto los códigos propuestos en clase, así como (a ser posible) simulaciones con ordenadores personales.

3. Tiempo de trabajo del estudiante / Student workload

		Nº de horas	Porcentaje
Presencial	Clases teóricas	34 h	40%
	Clases prácticas	(%)	
	Seminarios	0 h (%)	
	Clases de corrección de problemas	6 h (%)	
	Presentación de los trabajos finales	0 h (%)	
No presencial	Resolución de problemas planteados	25 h (%)	60%
	Estudio semanal (4 horas x 10 semanas)	35 h (%)	
	Preparación del trabajo final	0 h (%)	
Carga total de horas de trabajo: 25 horas x 4 ECTS		100 h	

4. Métodos de evaluación y porcentaje en la calificación final / Evaluation procedures and weight of components in the final grade

Se adoptará un método de evaluación continua consonante con el carácter práctico de la asignatura y el tipo de competencias a desarrollar. La calificación estará basada en la evaluación de los problemas de programación y simulación planteados en los talleres de la asignatura. Otro aspecto a valorar es el análisis de los



Asignatura: Métodos Computacionales en Física de la Materia Condensada.
Código: 30602
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Física de la Materia Condensada y Nanotecnología
Nivel: Máster
Tipo: Asignatura Optativa
Nº de créditos: 4 ECTS

resultados de simulación (rangos de validez, errores estadísticos, etc.) desde el punto de vista del físico.

La nota final se obtendrá del siguiente modo: trabajos prácticos 80%, participación en clase e iniciativa 20%. Los tres trabajos propuestos atienden a la siguiente agrupación de Contenidos de la asignatura (véase el cronograma): Temas 1-3, 4-8 y 9-11, con los siguientes pesos 25%, 50% y 25%, respectivamente/ **The qualification shall be computed in the following way: written reports 80%, participation in class 20%. The qualification for the written reports will be according to the contents of course calendar below: Contents 1-3, 25%; 4-8, 50%; and 9-11, 25%.**

Se usarán los mismos métodos y criterios de evaluación en la convocatoria extraordinaria / **The same criteria and procedures will be used for the extraordinary evaluation.**

5. Cronograma* / Course calendar

Semana Week	Contenido Contents	Horas presenciales Contact hours	Horas no presenciales Independent study time
1	Tight-binding methodology	4	10
2	Density functional theory	4	8
3	Transporte cuántico	2	4
4	Introducción a métodos Monte Carlo (MC)	4	2
5	Aplicación de MC en líquidos	4	5
6	Dinámica Molecular	4	5
7	Dinámica de Langevin; termostatos para MD	4	5
8	Dinámica Browniana: aplicación a cadenas poliméricas	4	5
9	Potenciales Clásicos	4	5
10	Monte Carlo Cuántico	4	5
11	Aplicaciones de MCC	2	6

*Este cronograma tiene carácter orientativo.