



Asignatura: Métodos Computacionales en Física de la Materia Condensada y Biomoléculas
Código: 32678
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Física de la Materia Condensada y de los Sistemas Biológicos
Nivel: Master
Nº de créditos: 4 ECTS

ASIGNATURA / COURSE TITLE

Métodos Computacionales en Física de la Materia Condensada y Biomoléculas / [Computational Methods in Condensed Matter and Biomolecules](#)

1.1. Código / Course number

32678

1.2. Materia / Content area

Módulo de especialidad: Nanofísica y Biofísica / [Specialization module: Nanophysics and Biophysics](#)

1.3. Tipo / Course type

Optativo / [Elective](#)

1.4. Nivel / Course level

Máster / [Master \(second cycle\)](#)

1.5. Curso/ Year

1º / 1

1.6. Semestre / Semester

2º / [2nd \(Spring semester\)](#)

1.7. Idioma / Language

Español, Inglés / [Spanish, English](#)

1.8. Requisitos previos / Prerequisites

Los alumnos deben haber aprobado al menos la asignatura troncal de Máster 'Física-Química de Sistemas Complejos' y las asignaturas obligatorias de especialidad del primer semestre, o demostrar conocimientos equivalentes por otros cursos de posgrado. Por otro lado es conveniente tener algún conocimiento sobre programación en algún lenguaje estándar (fortran, C o similar). / [The students should have attended and passed at least the common Master subject 'Physical-chemistry of complex systems' and the specialization compulsory subjects of the first semester, or credit](#)



Curso 2018-2019

Asignatura: Métodos Computacionales en Física de la Materia Condensada y Biomoléculas

Código: 32678

Centro: Facultad de Ciencias

Titulación: Máster en Física de la Materia Condensada y de los Sistemas Biológicos

Nivel: Master

Nº de créditos: 4 ECTS

equivalent knowledge from other postgraduate courses. It is also convenient to have some previous expertise on some standard programming language (fortran, C or similar).

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**

Coordinador/ **Coordinator** Rafael Delgado Buscalioni
Departamento de Física Teórica de la Materia Condensada/ **Department of**
Facultad Ciencias/ **Faculty Science**
Despacho -509 Módulo C-5/ **Office - Module**
Teléfono / **Phone**: 3667
Correo electrónico/**Email**: rafael.delgado@uam.es
Correo electrónico/**Email**: rafael.delgado@uam.es
Página web/**Website**: <http://www.uam.es/rafael.delgado>
Horario de atención al alumnado/**Office hours**:
L & X 13:00-14:00/ **M & W 13:00-14:00**

1.11. Objetivos del curso / **Course objectives**

Conocer las herramientas básicas de simulación por computador en física de la materia condensada./ **To know the basic tools of computer simulation in different fields of condensed matter physics.**

Conocer las herramientas básicas de simulación computacional de biomoléculas a escala atómica./ **To know the basic tools for the computer simulation of biomolecules at the atomic level.**

Ser capaz de programar herramientas básicas de simulación./**To know how to program basic simulations tools.**

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.**

Aprender a organizar, planificar y documentar la redacción de un código de



Curso 2018-2019

Asignatura: Métodos Computacionales en Física de la Materia Condensada y Biomoléculas

Código: 32678

Centro: Facultad de Ciencias

Titulación: Máster en Física de la Materia Condensada y de los Sistemas Biológicos

Nivel: Master

Nº de créditos: 4 ECTS

simulación, así como la presentación de los resultados./ [know how to organize, program and write a documentation of a code and present results of simulations.](#)

Las competencias del curso correspondientes en la Memoria de Verificación

del título

del Master son CG[1-4], CG[6-10] y CE[6-10].

[The skills \(“Competencias”\) of the course appearing in the “Memoria de Verificación del título del Master” are labelled as CG\[1-4\], CG\[6-10\] y CE\[6-10\].](#)

1.12. Contenidos del programa / [Course contents](#)

- ⤴ **Introducción:** particularidades de los métodos computacionales en materia condensada (y biomoléculas).
- ⤴ **Repaso de probabilidad,** muestreo de distribuciones de variables aleatorias
- ⤴ **Método de Monte Carlo:** metodología y aplicaciones (modelo de red, cadena polimérica, coloides).
- ⤴ **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.
- ⤴ **Potenciales de interacción clásicos:** fundamentos. Campos de Fuerzas para Biomoléculas.
- ⤴ **Métodos de estructura electrónica.** Dinámica Molecular Cuántica.
- ⤴ **Métodos de orbitales localizados.** Métodos Tight-Binding y Tight-Binding Molecular Dynamics.
- ⤴ **Teoría del Funcional de la Densidad (DFT).**

1.13. Referencias de consulta / [Course bibliography](#)

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA / [BASIC BIBLIOGRAPHY:](#)

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



Curso 2018-2019

Asignatura: Métodos Computacionales en Física de la Materia Condensada y Biomoléculas

Código: 32678

Centro: Facultad de Ciencias

Titulación: Máster en Física de la Materia Condensada y de los Sistemas Biológicos

Nivel: Master

Nº de créditos: 4 ECTS

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 Atomistic 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) Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods, (Richard M. Martin, Cambridge University Press)

2. Métodos docentes / Teaching methodology

Clases teóricas: exposición por parte de los profesores de los contenidos teóricos fundamentales de cada tema. **Theoretical Classes:** explanation of the theoretical aspects of the different methodologies explained in the course.

Clases prácticas: Se trata de una asignatura esencialmente práctica. Una parte importante de la docencia presencial está formada por talleres de resolución de problemas prácticos por parte de los estudiantes que estarán supervisados por el profesor. Se realizarán ejercicios de programación y simulación en cada una de las áreas del programa y trabajos de profundización / **Practical Classes and workshops** This course is based on practise and in fact the different methods will be mainly coded by the students under the supervision of the teacher and run in computer to resolve exercises and the final reseach projects.

Discusiones en grupo: Los codigos de simulación desarrollados, o aplicados en casos practicos serán puestos en común para entender las dificultades de cada alumno y las diferentes estrategias de solución posibles. **Group discussions:** the codes and applications developed by the students will be discussed in group so as to discern typical difficulties encountered and possible solutions

Estudio/trabajo personal / Aprendizaje autónomo académicamente dirigido por el profesor a través de tareas/ejercicios propuestos. Muchos de estos ejercicios requieren cálculo de computador, así una parte relevante del trabajo personal será poner a punto los códigos propuestos en clase, así como (a ser posible) a realizar simulaciones con ordenadores personales, si bien, en caso necesario podrán ser



Curso 2018-2019

Asignatura: Métodos Computacionales en Física de la Materia Condensada y Biomoléculas

Código: 32678

Centro: Facultad de Ciencias

Titulación: Máster en Física de la Materia Condensada y de los Sistemas Biológicos

Nivel: Master

Nº de créditos: 4 ECTS

usados las facilidades de la UAM. **Personal study/work:** Autonomous work supervised by the teacher is an essential part of this course. To that end a list of excersises with increasing complexity will be proposed and will allow to develop the tools which will be linked at the end of the course to create the molecular solver and analysis tools. Work is usually done in personal computers, although if required computers can be furnished by the institution facilities.

3. Tiempo de trabajo del estudiante / **Student workload**

		Nº de horas	Porcentaje
Presencial	Clases teóricas	18 h	38 %
	Clases prácticas	20 h	
	Tutorías	2 h	2 %
No presencial	Estudio/ejercicios	40 h	60 %
	Preparación trabajos	20 h	
Carga total de horas de trabajo		100 h	



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

Resolución y presentación de ejercicios prácticos: [40-60] %

Realización y presentación de trabajos en los que se requiere una profundización/ampliación de algún tema de la asignatura: [40-60] %

Exersises of applied computing problems [40-60]%

Research work on one of the proposed problems/subjects [40-60]%

5. Cronograma* / Course calendar

Semana aprox. Week	Contenido Contents	Horas presenciales Contact hours	Horas no presenciales Independent study time
1	Introduction and review of probability	4	5
2	Monte-Carlo	4	6
3	Molecular Dynamics	4	6
4	Langevin Dynamics	4	6
5	Work on applications	4	6
6	Interaction potentials	4	6
7,8	Electronic structure	6	8
8,9	Localized orbitals	6	8
10	Density Functional Theory (DFT)	4	6