



Asignatura: Simulación y Métodos Numéricos en Materiales y Nanoestructuras
Código: 32303
Centro: Ciencias
Titulación: Máster en Materiales Avanzados, Nanotecnología y Fotónica
Nivel: Máster
Tipo: Optativa
Nº de créditos: 5 ECTS

ASIGNATURA / COURSE TITLE

1.1. Simulación y métodos numéricos en materiales y nanoestructuras

Código / Course number

32303

1.2. Materia / Content area

Simulación y métodos numéricos en materiales y nanoestructuras

1.3. Tipo / Course type

Formación optativa

1.4. Nivel / Course level

Master (second cycle)

1.5. Curso / Year

1º/1st

1.6. Semestre / Semester

2º/2nd

1.7. Idioma / Language

Español. Se emplea también Inglés en material docente / In addition to Spanish, English is also extensively used in teaching material

1.8. Requisitos previos / Prerequisites

Licenciatura, Grado o Ingeniería.

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

La asistencia es obligatoria al menos en un 80% / Attendance at a minimum of 80% of in-class sessions is mandatory



Asignatura: Simulación y Métodos Numéricos en Materiales y Nanoestructuras
 Código: 32303
 Centro: Ciencias
 Titulación: Máster en Materiales Avanzados, Nanotecnología y Fotónica
 Nivel: Máster
 Tipo: Optativa
 N° de créditos: 5 ECTS

1.10. Datos del equipo docente / Faculty data

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Antonio Arranz (Coordinador)
 Departamento de / **Department of**: Física Aplicada
 Facultad / **Faculty**: Ciencias
 Despacho - Módulo M12-502-II
 Teléfono / **Phone**: +34 91 497 6194
 Correo electrónico/**Email**: antonio.arranz@uam.es
 Página web/**Website**:
 Horario de atención al alumnado/**Office hours**:

1.11. Objetivos del curso / Course objectives

Este curso es una introducción a los métodos modernos de modelado y simulación. El objetivo es que el alumno sea capaz de aprender a diseñar, ejecutar y analizar simulaciones computacionales en ciencia de materiales. A través de distintos ejemplos, el alumno aprenderá las posibilidades de estos procedimientos de simulación para resolver algunos problemas interesantes en física de materiales. La realización de prácticas con ordenador será una parte inseparable del curso.

A través de la metodología docente empleada y las actividades formativas desarrolladas a lo largo del curso, el estudiante, al finalizar el mismo, será capaz de:

- Alcanzar las competencias generales y específicas de la materia y adquirir los conocimientos teóricos y prácticos descritos en sus contenidos.
- Desarrollar las competencias de carácter personal, interpersonal y vinculado al desarrollo ético y responsable de la profesión.

Estos resultados de aprendizaje contribuyen a la adquisición de las siguientes competencias del título:

BÁSICAS Y GENERALES

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

CB8 - Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios.

CB9 - Que los 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



Asignatura: Simulación y Métodos Numéricos en Materiales y Nanoestructuras
 Código: 32303
 Centro: Ciencias
 Titulación: Máster en Materiales Avanzados, Nanotecnología y Fotónica
 Nivel: Máster
 Tipo: Optativa
 N° de créditos: 5 ECTS

CB10 - Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.

2 - Saber trabajar en equipo y comunicarse con la comunidad académica en su conjunto y con la sociedad en general acerca de los materiales de nueva generación y sus implicaciones académicas, productivas o sociales.

3 - Manejar las principales fuentes de información científica, siendo capaces de buscar información relevante a través de internet, de las bases de datos bibliográficas y de la lectura crítica de trabajos científicos, conociendo la bibliografía especializada en Nanotecnología y Fotónica.

4 - Elaborar un trabajo escrito con datos bibliográficos, teóricos y experimentales, escribiendo un resumen o articulado en extenso, tal y como se realizan los artículos científicos, formulando hipótesis razonables, composiciones originales y conclusiones motivadas.

5 - Presentar públicamente los resultados de una investigación o un informe técnico, comunicar las conclusiones a un tribunal especializado, personas u organizaciones interesadas, y debatir con sus miembros cualquier aspecto relativo a los mismos.

ESPECÍFICAS:

9- Demostrar la capacidad necesaria para realizar un análisis crítico, evaluación y síntesis de ideas nuevas y complejas en el campo de la Fotónica y la Nanotecnología

10- Desarrollar la capacidad de síntesis y transferencia de los conocimientos adquiridos en el campo de la Fotónica y la Nanotecnología para fomentar la integración multidisciplinar en áreas tales como la medicina, el medioambiente, la biomedicina, la química y la biología.

11- Dominar los fundamentos teóricos y prácticos de técnicas con las que se pueda realizar la caracterización de materiales tanto química y de la estructura electrónica, como morfológica, composicional y estructural

13- Manejar e interpretar los fundamentos y los aspectos más innovadores y algunas aplicaciones de última generación de materiales semiconductores y magnéticos y dispositivos electrónicos y opto-electrónicos de elevadas prestaciones.

1.12. Contenidos del programa / Course contents

1. Fundamentos de programación. Conceptos básicos de programación en C++: sintaxis básica y estructuras. Operadores. Arrays. Funciones. Argumentos de una función pasados por referencia. Punteros. Memoria dinámica.

2. Métodos de Monte Carlo: métodos numéricos estadísticos basados en el método de Monte Carlo; generación de números aleatorios; integración numérica mediante método de Monte Carlo; camino aleatorio y difusión.



Asignatura: Simulación y Métodos Numéricos en Materiales y Nanoestructuras
 Código: 32303
 Centro: Ciencias
 Titulación: Máster en Materiales Avanzados, Nanotecnología y Fotónica
 Nivel: Máster
 Tipo: Optativa
 N° de créditos: 5 ECTS

3. Técnicas numéricas de modelado y optimización de datos experimentales: métodos de suavizado. Optimización no lineal.. Aplicación al análisis de espectros en Física de superficies (XPS, AES, etc.)
4. Resolución de Ecuaciones Diferenciales en Derivadas Parciales: Métodos de diferencias finitas para ecuaciones en derivadas parciales; aplicaciones a las ecuaciones de Laplace, calor y ondas.
5. Modelado y simulación aplicados al estudio de materiales: a) aplicación del método de Análisis de Factores al estudio mediante AES de las primeras etapas de la oxidación del Ni; b) aplicación al estudio de la implantación iónica mediante el programa TRIM (*Transport of Ions in Matter*).
6. Modelado y simulación aplicados al estudio de estructuras fotónicas.

1.13. Referencias de consulta / Course bibliography

- Análisis Numérico con Aplicaciones. C.F. GERALD y P.O. WHEATLEY. Editorial Addison-Wesley.
- Análisis Numérico. R.L. BURDEN, J. DOUGLAS FAIRES. Editorial International Thomson Editores.
- Cálculo Numérico. B. CARNAHAN, H.A. LUTHER y J.O. WILKES. Editorial Rueda.
- Elementary Numerical Analysis. KENDALL ATKINSON. John Wiley and Sons.
- Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing. Cambridge Univ. Press.

2. Métodos docentes / Teaching methodology

La docencia se desarrollará preferentemente en las aulas de informática, donde será obligatoria la asistencia.
 Se realizarán tutorías periódicas en las que los alumnos podrán consultar dudas sobre los aspectos en los que hayan encontrado mayores dificultades.



Asignatura: Simulación y Métodos Numéricos en Materiales y Nanoestructuras
 Código: 32303
 Centro: Ciencias
 Titulación: Máster en Materiales Avanzados, Nanotecnología y Fotónica
 Nivel: Máster
 Tipo: Optativa
 N° de créditos: 5 ECTS

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

125 h

		Nº de horas	Porcentaje
Presencial	Clases teóricas	40 h	32%
	Clases prácticas		
No presencial	Realización de actividades prácticas	25 h	68%
	Estudio semanal (8h/semana x 5.5 semanas)	44 h	
	Preparación de prácticas	16 h	
Carga total de horas de trabajo: 25 horas x 5 ECTS		125 h	

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

Convocatoria ordinaria

Se realizará una evaluación continua de las prácticas y trabajos entregados por los alumnos en las sesiones de prácticas, cuya asistencia es obligatoria. La calificación final del curso corresponderá a la suma de las notas de seguimiento.

Convocatoria extraordinaria

- A los alumnos que hayan suspendido en la convocatoria ordinaria pero que hayan realizado el 80% de las prácticas programadas, se les podrá guardar la nota de esta parte (70%) y tendrán que realizar un examen teórico que representará el 30% de la calificación final.
- Aquellos alumnos que no hayan realizado el 80% de las prácticas programadas, tendrán que realizar tanto un examen práctico (70%) como uno teórico (30%).

Los resultados de aprendizaje serán evaluados a lo largo del curso mediante los métodos de evaluación arriba expuestos.

En las clases prácticas se evaluarán los resultados de aprendizaje/competencias relacionados con la aplicación de los contenidos teóricos a la resolución de problemas concretos. Se evaluarán las competencias CB6, CB7, CB8, CB10 y 2.



Asignatura: Simulación y Métodos Numéricos en Materiales y Nanoestructuras
 Código: 32303
 Centro: Ciencias
 Titulación: Máster en Materiales Avanzados, Nanotecnología y Fotónica
 Nivel: Máster
 Tipo: Optativa
 Nº de créditos: 5 ECTS

En la elaboración de informes se evaluará la capacidad de análisis y síntesis, de búsqueda y selección de información y de presentación e interpretación de resultados. Se evaluarán las competencias CB6, CB7, CB8, CB9, 2, 3, 4 y 5.

En los exámenes escritos se evaluarán los resultados del aprendizaje relacionados con la adquisición de contenidos teóricos y su aplicación a la resolución de problemas, así como el análisis crítico y la capacidad de síntesis. Se evaluarán las competencias CB6, CB7, CB8, 3, 4 y 5.

5. Cronograma / Course calendar

Tema	Tipología	Horas Presenciales Contact hours	Horas no presenciales Independent study time
1	Clases Teóricas	2	6
	Clases Prácticas / Seminarios	16	16
2	Clases Teóricas	1	2
	Clases Prácticas / Seminarios	8	8
3	Clases Teóricas	2	2
	Clases Prácticas / Seminarios	8	8
4	Clases Teóricas	2	2
	Clases Prácticas / Seminarios	6	6
5	Clases Teóricas	2	2
	Clases Prácticas / Seminarios	6	6
6	Clases Teóricas	1	1
	Clases Prácticas / Seminarios	6	6