

Curso
2026/2027

Guía Docente:

SIMULACIÓN DE MATERIALES



FACULTAD DE
CIENCIAS QUÍMICAS

1. IDENTIFICACIÓN

Titulación	Máster en Química de Materiales para el Futuro	Código	610600
Asignatura	Simulación de Materiales	ECTS	5
Materia	Simulación		
Módulo	Investigación y Desarrollo en Química de Materiales		
Especialidad	Investigación y Desarrollo en Química de Materiales		
Carácter	Optativa	Semestre	Segundo
Departamento responsable	Química Física (QF) Ingeniería Química y de Materiales (IQM)		

Profesores responsables

Actividad	Profesor	Email	Despacho	Departamento
Teoría Seminarios Prácticas	Luis González McDowell	lugonzal@ucm.es	QB-235	QF
Teoría Seminarios Prácticas	Fernando Izquierdo Ruiz	ferizqui@ucm.es	QA-274	QF
Teoría Seminarios Prácticas	Germán Alcalá Penadés	galcalap@ucm.es	QA-131J	IQM

2. OBJETIVOS

El objetivo de esta asignatura es la adquisición de conocimientos, habilidades, destrezas y competencias en el ámbito de la Simulación de Materiales, incluidos los conceptos fundamentales, las herramientas de programación y los programas de simulación de uso en la Química de los Materiales.

1. Desarrollar y emplear herramientas básicas de programación y análisis de datos sobre entornos Linux.
2. Utilizar herramientas de cálculo computacional cuántico para modelar y predecir propiedades de interés en la Química de los Materiales.
3. Emplear herramientas de simulación molecular para modelar propiedades de sistemas multifásicos de interés en la Química de los Materiales.
4. Identificar las técnicas de simulación adecuadas para modelar materiales escogidos.

3. CONTEXTUALIZACIÓN EN EL MÁSTER

La asignatura se oferta como optativa dentro del conjunto de asignaturas que constituyen el módulo de especialización, formando parte de la materia titulada Simulación de Materiales, perteneciente a la especialidad Investigación y desarrollo en química de materiales

En esta asignatura se introducen las herramientas computacionales fundamentales empleadas en las ciencias de los materiales. Con el advenimiento de las modernas técnicas de computación, las técnicas de simulación se han convertido en la tercera gran metodología científica, junto con los experimentos y la teoría. En el ámbito de la Ciencia de los Materiales en particular, la simulación molecular es una herramienta indispensable por su enorme versatilidad y transversalidad. Su uso permite predecir propiedades de difícil medida

experimental; interpretar, complementar o confirmar hipótesis teóricas; ayudar al entendimiento de los experimentos como una técnica de caracterización más; o incluso servir de guía en la determinación estructural y el diseño de materiales. En este curso, se estudian los fundamentos transversales de la computación, junto con las herramientas más significativas de la modelización molecular mediante un enfoque eminentemente práctico, con énfasis en la aplicación a sistemas de interés en la Química de los Materiales. Es por tanto una asignatura transversal, con aplicaciones en la caracterización, comprensión y diseño de todos los tipos de materiales cubiertos en el Máster.

4. CONTENIDOS

Conocimientos básicos

Elementos de programación. Análisis y visualización de datos. Inteligencia artificial. Estructura Electrónica: Sólidos cristalinos, Sistemas bidimensionales, Sistemas confinados. Simulación molecular de materiales: modelos atomísticos, sistemas multifásicos y modelos de multiescala.

Contenidos generales

1. Programación de alto nivel
2. Estructura y propiedades electrónicas de los materiales
3. Propiedades estructurales, mecánicas y dinámicas de materiales moleculares
4. Simulación de sistemas complejos en materia blanda

Programa

BLOQUE 1. HERRAMIENTAS INFORMÁTICAS DE SIMULACIÓN

Tema 1. Introducción a la programación

Sistema Linux. Principios básicos de Python. Expresiones y variables. Estructuras de control. Funciones. Programación modular. Librerías.

Tema 2. Análisis de Datos.

Tipos de datos. Estructuras de lectura y escritura. Procesamiento de datos. Bancos de datos moleculares. Visualización molecular.

Tema 3. Inteligencia Artificial

Introducción. Redes Neuronales y Redes Neuronales Artificiales. Reglas de entrenamiento supervisado y no supervisado. Funciones de activación. Estructuras de conexión. Métodos de regresión.

Prácticas I y II

BLOQUE 2. MÉTODOS DE SIMULACIÓN CUÁNTICOS.

Tema 4. Teoría de Funcionales de la Densidad

Teoremas de Hohenberg-Kohn, la aproximación de Kohn-Shan, funcionales de correlación-intercambio.

Tema 5. Sistemas Cristalinos y Estructura Electrónica

Redes de Bravais, el espacio recíproco, planos de red e índices de Miller, zonas de Brillouin, teorema de Bloch. Bandas electrónicas, orbitales cristalinos, densidad de estados, band gap y densidad electrónica. Cálculo de estructura electrónica. Cálculo de vibraciones en sólidos.

Tema 6. Superficies, sistemas laminares y medios confinados.

Fundamentos de cálculo y parámetros computacionales. Propiedades electrónicas y características de las superficies, sistemas laminares y de los medios confinados. Energías de adsorción, cambios de dimensionalidad, transiciones y sistemas correlacionados. Prácticas II, III y IV

Prácticas III, IV y V.

BLOQUE 3. MÉTODOS DE SIMULACIÓN CLÁSICOS.**Tema 7. Fuerzas moleculares y potenciales de interacción.**

Distribución electrónica. Energía potencial. Potenciales empíricos y campos de fuerzas. Modelización de potenciales con redes neuronales.

Tema 8. Dinámica Molecular Clásica.

Las ecuaciones de Newton. Evaluación numérica de trayectorias. Estabilidad y conservación de la energía. Condiciones de contorno. Esquemas de truncamiento.

Tema 9. Técnicas avanzadas.

Evaluación eficiente de fuerzas. Termostatos. Barostatos. Campos de fuerza multicéntricos. Grados internos de libertad. Dinámica Browniana. Modelos de mesoescala.

Tema 10. Aplicaciones en simulación molecular de materiales.

Superficies, interfases, polímeros y biopolímeros.

Prácticas VI, VII y VIII.

Prácticas:

Práctica I: Análisis de datos con Python.

Práctica II: Inteligencia artificial.

Práctica III: Simulación de sólidos tridimensionales.

Práctica IV: Simulación de superficies.

Práctica V: Simulación de materiales de dimensionalidad reducida.

Práctica VI: Simulación Molecular de un metal noble.

Práctica VII: Simulación molecular de interfases y sistemas confinados.

Práctica VIII: Simulación molecular en materia blanda.

5. RESULTADOS DE APRENDIZAJE**Conocimientos y contenidos**

RA3(EIDQM)	Explicar los principios que rigen las simulaciones moleculares y cálculos teóricos en distintas condiciones experimentales.
------------	---

Destrezas y habilidades

RA16(EIDQM)	Seleccionar herramientas de simulación y cálculo teórico adecuadas para distintos problemas de la Química de Materiales.
-------------	--

Competencias

RA27(EIDQM)	Formular y desarrollar algoritmos y códigos para el tratamiento y análisis de datos masivos en sistemas complejos, implementando soluciones efectivas que optimicen la gestión de información.
RA28(EIDQM)	Diseñar estrategias de cálculo computacional desde la escala electrónica hasta la mesoescala.

6. HORAS DE TRABAJO Y DISTRIBUCIÓN POR ACTIVIDAD

Actividad	Presencial (horas)	Trabajo autónomo	Créditos (ECTS)
Seminarios	18	28	1,84
Trabajos tutorizados	24	12	1,44
Preparación de exámenes	2	41	1,72
Total	44	81	5

7. METODOLOGÍA

Esta asignatura se ha diseñado con un carácter eminentemente práctico y orientada hacia el aprendizaje de software especializado en el diseño de materiales. Por este motivo, los conceptos teóricos se imparten someramente en una serie de seminarios (1,84 créditos ECTS), cuyo contenido se aplican en las consiguientes sesiones prácticas (1,44 créditos ECTS). Las clases de seminario introducirán conceptos teóricos básicos, que deberán profundizarse con ayuda del material bibliográfico del curso. Las clases prácticas o 'laboratorio', que constituyen el grueso del curso, se realizarán en el aula informática. Su objetivo es la puesta en práctica de las técnicas de computación descritas en los seminarios. La formación se complementará con la preparación de trabajos (1,72 ECTS) y ejercicios tras las sesiones de seminario y prácticas. Para ello se utilizará software especializado de programación, aplicado a la modelización de sistemas o problemas de interés en la química de los materiales.

8. BIBLIOGRAFÍA

Además del material que por parte del profesor se pondrá a disposición del alumno, se recomiendan los siguientes libros y recursos en línea:

- "An Introduction to Statistical Learning with Applications in Python". Gareth James, Daniela Witten, Trevor Hastie, Robert Tibshirani & Jonathan Taylor, Springer Texts in Statistics 2023 (<https://doi.org/10.1007/978-3-031-38747-0>).
- "Introduction to Solid State Physics". C. Kittel, John Wiley & Sons (2005, 8th Edition).
- "Simulaciones computacionales de materiales y nanoestructuras". N. Takeuchi & A. H. Romero. Ed. Científicas Universitarias (2019, e-book -disponible en la biblioteca).
- "Materials Modelling using density functional theory: Properties and predictions" Feliciano Giustino, Oxford University Press (2014).
- "Chemical Bonding in Solids" Jeremy K. Burdett, Oxford University Press, (1995).

- “*Molecular Modelling: Principles and Applications*”. A. Leach, Prentice Hall (2001, 2nd Edition).
- “*Understanding Molecular Simulation*”. D. Frenkel y B. Smit, Academic Press (2002, 2nd Edition).
- “*Computer Simulation of Liquids*”, M. Allen, D. Tildesley, Clarendon Press (2017, 2nd Edition).

9. EVALUACIÓN

El rendimiento académico del estudiante se computará atendiendo a la calificación del examen final y del trabajo realizado durante las prácticas en el aula de informática, así como mediante la evaluación de las cuestiones teóricas y los ejercicios y/o problemas facilitados por el profesor para adquirir la formación básica en distintos ámbitos de la materia. Para el cálculo de la nota final se utilizarán los siguientes factores de ponderación:

❖ **EXAMEN FINAL: 30%**

Se evaluarán los contenidos teóricos y prácticos de la asignatura. Se llevará a cabo en el aula de informática.

❖ **LABORATORIO: 35%**

Se evaluarán la actitud y el trabajo individual en cada práctica, así como la calidad de los resultados obtenidos, como muestra del aprovechamiento de cada sesión. La asistencia a todas las sesiones de laboratorio es obligatoria.

❖ **TRABAJO PERSONAL Y ASISTENCIA: 35%**

Se evaluará el trabajo personal a través de la resolución de cuestiones, ejercicios y/o problemas propuestos por el profesor a lo largo del desarrollo de la asignatura. La participación activa en las actividades presenciales se considerará favorablemente.

Las calificaciones de cada apartado estarán basadas en la puntuación absoluta sobre 10 puntos y de acuerdo con la escala establecida en el RD 1125/2003. La calificación final resultará de la media ponderada de las actividades evaluables. No obstante, para superar la asignatura será necesario alcanzar una nota mínima de 4 sobre 10 en cada una de las actividades evaluables. En caso de no cumplirse este requisito, la calificación final será la media ponderada obtenida, con un máximo de 4,5 sobre 10. Además, para poder acceder a la evaluación final en la convocatoria ordinaria será necesario que el estudiante haya participado al menos en el 70 % del total de las actividades presenciales.

Los/las estudiantes que no alcancen la calificación mínima establecida en la convocatoria ordinaria en los apartados 2 y/o 3 deberán entregar al profesor una serie de ejercicios resueltos, equivalentes a los propuestos a lo largo de la asignatura. La calificación final de la convocatoria extraordinaria se registrará por los mismos criterios de evaluación aplicados en la convocatoria ordinaria.