



DATOS IDENTIFICATIVOS

Simulación computacional

Materia	Simulación computacional			
Código	V11M188V01107			
Titulación	Máster Universitario en Nanociencia e Nanotecnoloxía			
Descritores	Creditos ECTS	Sinale	Curso	Cuadrimestre
	3	OP	1	1c
Lingua de impartición	Castelán Galego Inglés			
Departamento	Química Física			
Coordinador/a	Pérez Juste, Ignacio Mandado Alonso, Marcos			
Profesorado	Hervés Beloso, Juan Pablo Mandado Alonso, Marcos Pérez Juste, Ignacio			
Correo-e	mandado@uvigo.es uviqipj@uvigo.es			
Web	http://www.usc.gal/gl/estudios/masteres/ciencias-saude/master-universitario-nanociencia-nanotecnoloxia/20212022/simulacion-computacional-17797-17029-3-98997			
Descrición xeral	Introdución ó estado da arte das técnicas de simulación computacional en nanomateriais, as técnicas de modelización e simulación, así como os principais tipos de recursos computacionais.			

Resultados de Formación e Aprendizaxe

Código

Resultados previstos na materia

Resultados previstos na materia	Resultados de Formación e Aprendizaxe
---------------------------------	---------------------------------------

Contidos

Tema

- Introdución as técnicas de simulación numérica
- Modelos clásicos, semi-clásicos e cuánticos
- Técnicas de simulación Monte-Carlo
- Ferramentas de simulación
- Técnicas de computación HPC e HTC

Planificación

	Horas na aula	Horas fóra da aula	Horas totais
Lección maxistral	10	20	30
Seminario	8	24	32
Prácticas de laboratorio	6	7	13
Exame de preguntas obxectivas	0	0	0

*Os datos que aparecen na táboa de planificación son de carácter orientador, considerando a heteroxeneidade do alumnado.

Metodoloxía docente

	Descrición
Lección maxistral	Exposición por parte do profesor/a dos contidos sobre a materia obxecto de estudo, bases teóricas e/ou directrices dun traballo, exercicio que o/a estudante ten que desenvolver.

Seminario	Actividade enfocada ao traballo sobre un tema específico, que permite afondar ou complementar os contidos da materia. Pódese empregar como complemento das clases teóricas
Prácticas de laboratorio	Actividades de aplicación dos coñecementos a situacións concretas e de adquisición de habilidades básicas e procedementais relacionadas coa materia obxecto de estudo. Desenvólvense en espazos especiais con equipamento especializado (Laboratorios, aulas informáticas, etc...)

Atención personalizada

Avaliación

	Descrición	Cualificación	Resultados de Formación e Aprendizaxe
Seminario	- Participación activa nos seminarios, clases prácticas e/ou presentacións orais (40% da cualificación). Avaliarase a participación activa en seminarios e prácticas de laboratorio. Esta avaliación levarase a cabo mediante a resolución de cuestións e problemas expostos na clase, a presentación de traballos, a realización de tests e/ou a intervención nos debates que poidan xurdir.	40	
Exame de preguntas obxectivas	- Exame escrito sobre os contidos da materia (60% da cualificación). O exame da materia consistirá en preguntas de resposta curta ou tipo test e/ou resolución de problemas.	60	

Outros comentarios sobre a Avaliación

Bibliografía. Fontes de información

Bibliografía Básica

J. M. Thijssen, **Computational Physics**, Cambridge University Press, 1999

R. M. Martin, **Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods**, Cambridge University Press, 2004

O.C. Zienkiewicz, R.L. Taylor, J.Z. Zhu, **The Finite Element Method: Its Basis and Fundamentals**, Elsevier Butterworth-Heinemann, 2005

P. Pacheco, **An Introduction to Parallel Programming**, Morgan Kaufmann Publishers, 2011

C. J. Cramer, **Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models**, 2nd, Wiley, 2005

Bibliografía Complementaria

Recomendacións