Guia docent
295910 - SAMEB - Simulació Avançada de Materials per a l'Enginyeria i la Bioenginyeria

Última modificació: 02/10/2025

Unitat responsable: Escola d'Enginyeria de Barcelona Est
Unitat que imparteix: 713 - EQ - Departament d'Enginyeria Química.

Titulació: GRAU EN ENGINYERIA BIOMÈDICA (Pla 2009). (Assignatura optativa).
GRAU EN ENGINYERIA QUÍMICA (Pla 2009). (Assignatura optativa).
GRAU EN ENGINYERIA DE MATERIALS (Pla 2010). (Assignatura optativa).

Curs: 2025 **Crèdits ECTS:** 6.0 **Idiomes:** Català, Castellà, Anglès

PROFESSORAT

Professorat responsable:

Altres:

CAPACITATS PRÈVIES

Coneixements bàsics de química i física

METODOLOGIES DOCENTS

L'assignatura consta de quatre hores a la setmana a l'aula d'informàtica: dues corresponen a classes expositives i exercicis pràctics guiats, i amb ordinador. Les altres dues hores de classe correspondran al desenvolupament d'un projecte de simulació de materials amb ordinador.
El temari es dividirà en quatre parts i en cada una d'elles s'haurà de realitzar un treball no presencial basat en els projectes de simulació desenvolupats al laboratori. Al llarg del curs es treballaran en grups diferents articles de simulació que s'exposaran i discutiran a classe.

OBJECTIUS D'APRENENTATGE DE L'ASSIGNATURA

Es plantejarà una assignatura basada en projectes i objectius a curt termini. Així doncs l'alumne realitzarà tot un seguit d'exemples pràctics de simulació atomística de materials avançats que s'aniran desenvolupant al llarg de tot el curs per tal d'entendre el seu comportament, la interrelació amb el seu entorn, i enfocats en el camp de l'Enginyeria Química, de materials, de la catàlisi i bioenginyeria. A través de les tècniques de simulació computacional es pretén que l'alumne tingui una visió més explícita dels diferents nivells d'organització de la matèria en funció de l'escala de la grandària i del marc temporal dels fenòmens físics que s'estudien a nivell experimental.

Els principals objectius formatius són:
• Familiaritzar els alumnes amb els conceptes bàsics de la simulació atomística de materials i biomaterials
• Proporcionar eines per a la visualització i manipulació de sistemes atomístics per a l'enginyeria i la bioenginyeria
• Familiaritzar els alumnes en les tècniques de simulació basades en la dinàmica molecular

HORES TOTALS DE DEDICACIÓ DE L'ESTUDIANTAT

Tipus	Hores	Percentatge
Hores grup gran	45,0	30.00
Hores aprenentatge autònom	90,0	60.00
Hores grup petit	15,0	10.00

Dedicació total: 150 h

CONTINGUTS

1. Introducció al modelatge molecular

Descripció:
• Introducció
• Coneixement de l'entorn de treball: Sistema operatiu Linux
• Comandes bàsiques de Linux
• Scripts
• Descripció i representació de models atomístics

Activitats vinculades:
• Classes teòriques i exercicis guiats
• Pràctica 1: introducció al Linux

Dedicació: 30h
Grup gran/Teoria: 4h
Grup mitjà/Pràctiques: 8h
Aprenentatge autònom: 18h

2. Model clàssic. Estudis conformacionals de materials i proteïnes

Descripció:
• Representació i visualització de cristalls, materials amorfs i proteïnes
• Representació de les interaccions atòmiques: force-field
• Dinàmica molecular de sistemes

Activitats vinculades:
• Classes teòriques i exercicis guiats
• Pràctica 2: Estudi estructural d'un polímer, cristall i/o proteïna

Dedicació: 30h
Grup gran/Teoria: 4h
Grup mitjà/Pràctiques: 8h
Aprenentatge autònom: 18h

3. Model quàntic. Catàlisi heterogènia i enzimàtica

Descripció:
• Modelització de sistemes amb reacció química
• Tècniques de simulació quàntiques

Activitats vinculades:
• Classes teòriques i exercicis guiats
• Practica 3: Simulació d'un procés de catàlisi heterogènia i/o enzimàtica

Dedicació: 30h
Grup gran/Teoria: 4h
Grup mitjà/Pràctiques: 8h
Aprenentatge autònom: 18h

4. Aplicacions. Simulació avançada de materials

Descripció:
- Polímers
- Materials híbrids i sistemes heterogenis
- Processos enzimàtics
- Bioinformàtica estructural: Fast threading, homology, disseny de fàrmacs per ordinador

Activitats vinculades:
- Classes teòriques i exercicis guiats
- Practica 4: Practica oberta de simulació aplicada amb tema lliure (a escollir entre un conjunt finit)

Dedicació: 60h
Grup gran/Teoria: 8h
Grup mitjà/Pràctiques: 16h
Aprenentatge autònom: 36h

SISTEMA DE QUALIFICACIÓ

L'avaluació de l'assignatura es durà a terme mitjançant la valoració de cada un dels quatre projectes que es desenvolupen al llarg del curso (4 x 20% = 80%) i del treball d'exposició a classe (20%).

NORMES PER A LA REALITZACIÓ DE LES PROVES.

No hi ha examen final

BIBLIOGRAFIA

Bàsica:
- Leach, Andrew R. Molecular modelling : principles and applications. 2nd ed. Harlow [etc.]: Addison Wesley, 2001. ISBN 0582382106.

Complementària:
- Cramer, Christopher J.. Essentials of computational chemistry : theories and models. 2nd ed. Wiley John & Sons, 2004. ISBN 9780470091821.
- van Santen, Rutger A.. Modern heterogeneous catalysis : an introduction. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2017. ISBN 9783527339617.