

Guía docente

295910 - SAMEB - Simulación Avanzada de Materiales para la Ingeniería y Bioingeniería

Última modificación: 12/04/2022

Unidad responsable: Escuela de Ingeniería de Barcelona Este
Unidad que imparte: 713 - EQ - Departamento de Ingeniería Química.

Titulación: GRADO EN INGENIERÍA BIOMÉDICA (Plan 2009). (Asignatura optativa).
GRADO EN INGENIERÍA QUÍMICA (Plan 2009). (Asignatura optativa).
GRADO EN INGENIERÍA DE MATERIALES (Plan 2010). (Asignatura optativa).

Curso: 2021 **Créditos ECTS:** 6.0 **Idiomas:** Catalán, Castellano, Inglés

PROFESORADO

Profesorado responsable: Juan Torras Costa

Otros: Segon quadrimestre:
DÍDAC MARTÍ BALLESTÉ - M10
JUAN TORRAS COSTA - M10
DAVID ZANUY GOMARA - M10

CAPACIDADES PREVIAS

Conocimientos básicos de química y física

METODOLOGÍAS DOCENTES

La asignatura consta de cuatro horas a la semana en el aula de informática: dos corresponden a clases expositivas y ejercicios prácticos guiados, y con ordenador. Las otras dos horas de clase corresponderán al desarrollo de un proyecto de simulación de materiales con ordenador.

El temario se dividirá en cuatro partes y en cada una de ellas deberá realizar un trabajo no presencial basado en los proyectos de simulación desarrollados en el laboratorio. A lo largo del curso se trabajarán en grupos diferentes artículos de simulación que se expondrán y discutirán en clase.

OBJETIVOS DE APRENDIZAJE DE LA ASIGNATURA

Se planteará una asignatura basada en proyectos y objetivos a corto plazo. Así pues el alumno realizará una serie de ejemplos prácticos de simulación atomística de materiales avanzados que se irán desarrollando a lo largo de todo el curso para entender su comportamiento, la interrelación con su entorno, y enfocados en el campo de la Ingeniería Química, de materiales, de la catálisis y bioingeniería. A través de las técnicas de simulación computacional se pretende que el alumno tenga una visión más explícita de los diferentes niveles de organización de la materia en función de la escala del tamaño y del marco temporal de los fenómenos físicos que estudian a nivel experimental.

Los principales objetivos formativos son:

- Familiarizar a los alumnos con los conceptos básicos de la simulación atomística de materiales y biomateriales
- Proporcionar herramientas para la visualización y manipulación de sistemas atomísticos para la ingeniería y la bioingeniería
- Familiarizar a los alumnos en las técnicas de simulación basadas en la dinámica molecular

HORAS TOTALES DE DEDICACIÓN DEL ESTUDIANTADO

| Tipo | Horas | Porcentaje |
|---------------------|-------|------------|
| Horas grupo grande | 20,0 | 33.33 |
| Horas grupo pequeño | 40,0 | 66.67 |

Dedicación total: 60 h

CONTENIDOS

1. Introducción al modelado molecular

Descripción:

- Introducción
- Conocimiento del entorno de trabajo: Sistema operativo Linux
- Comandos básicos de Linux
- Scripts
- Descripción y representación de modelos atomísticos

Actividades vinculadas:

- Clases teóricas y ejercicios guiados
- Práctica 1: introducción al Linux

Dedicación: 30h

Grupo grande/Teoría: 4h

Grupo mediano/Prácticas: 8h

Aprendizaje autónomo: 18h

2. Modelo clásico. Estudios conformacionales de materiales y proteínas

Descripción:

- Representación y visualización de cristales, materiales amorfos y proteínas
- Representación de las interacciones atómicas: force-field
- Dinámica molecular de sistemas

Actividades vinculadas:

- Clases teóricas y ejercicios guiados
- Práctica 2: Estudio estructural de un polímero, cristal y/o proteína

Dedicación: 30h

Grupo grande/Teoría: 4h

Grupo mediano/Prácticas: 8h

Aprendizaje autónomo: 18h



3. Modelo cuántico. Catálisis heterogénea y enzimática

Descripción:

- Modelización de sistemas con reacción química
- Técnicas de simulación cuánticas

Actividades vinculadas:

- Clases teóricas y ejercicios guiados
- Practica 3: Simulación de un proceso de catálisis heterogénea y/o enzimática

Dedicación: 30h

Grupo grande/Teoría: 4h

Grupo mediano/Prácticas: 8h

Aprendizaje autónomo: 18h

4. Aplicaciones. Simulación avanzada de materiales

Descripción:

- Polímeros
- Materiales híbridos y sistemas heterogéneos
- Procesos enzimáticos
- Bioinformática estructural: Fast threading, homology, diseño de fármacos por ordenador

Actividades vinculadas:

- Clases teóricas y ejercicios guiados
- Practica 4: Practica abierta de simulación aplicada con tema libre (a elegir entre un conjunto finito)

Dedicación: 60h

Grupo grande/Teoría: 8h

Grupo mediano/Prácticas: 16h

Aprendizaje autónomo: 36h

SISTEMA DE CALIFICACIÓN

La evaluación de la asignatura se llevará a cabo mediante la valoración de cada uno de los cuatro proyectos que se desarrollan a lo largo del curso ($4 \times 20\% = 80\%$) y del trabajo de exposición en clase (20%).

NORMAS PARA LA REALIZACIÓN DE LAS PRUEBAS.

No hay examen final

BIBLIOGRAFÍA

Básica:

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

Complementaria:

- van Santen, Rutger A.. Modern heterogeneous catalysis : an introduction. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2017. ISBN 9783527339617.

- Cramer, Christopher J.. Essentials of computational chemistry : theories and models. 2nd ed. Wiley John & Sons, 2004. ISBN 9780470091821.