UNIVERSIDADE DA CORUÑA

Guía Docente				
Datos Identificativos				2024/25
Asignatura (*)	Nanociencia e Nanotecnoloxía Computacional		Código	610G04034
Titulación				

Descriptores				
Ciclo	Período	Curso	Tipo	Créditos
Grao	1º cuadrimestre	Cuarto	Obrigatoria	6

Idioma	CastelánGalegoInglés		
Modalidade docente	Presencial		
Prerrequisitos			
Departamento	MatemáticasQuímica		
Coordinación	Santaballa Lopez, Juan Arturo	Correo electrónico	arturo.santaballa@udc.es
Profesorado	Ferreiro Ferreiro, Ana María García Rodríguez, José Antonio Rodriguez Ramos, Daniel Santaballa Lopez, Juan Arturo	Correo electrónico	ana.fferreiro@udc.es jose.garcia.rodriguez@udc.es danielr@udc.es arturo.santaballa@udc.es
Web	Campus Virtual / TEAMS da asignatura		
Descrición xeral	Esta asignatura proveerá @ estudante coas ferramentas necesarias para entender os fundamentos matemáticos e químico-físicos da simulación computacional de nanomateriais, así como o manexo práctico das técnicas e aplicacións informáticas de cara a súa modelización e simulación. Trátase de coñecemento, na escala nanométrica, de utilidade en diversos campos: ciencia de materiais, química, física, medicina, bioloxía, enxeñaría, así como na tecnoloxía.		

Competencias / Resultados do título	
Código	Competencias / Resultados do título

Resultados da aprendizaxe			
Resultados de aprendizaxe	Competencias / Resultados do título		
CE1 - Comprender los conceptos, principios, teorías y hechos fundamentales relacionados con la Nanociencia y Nanotecnología.	A1		
CE2 - Aplicar los conceptos, principios, teorías y hechos fundamentales relacionados con la Nanociencia y Nanotecnología a la resolución de problemas de naturaleza cuantitativa o cualitativa.	A2		
CE3 - Reconocer y analizar problemas físicos, químicos, matemáticos, biológicos en el ámbito de la Nanociencia y Nanotecnología, así como plantear respuestas o trabajos adecuados para su resolución, incluyendo el uso de fuentes bibliográficas.	A3		
CE5 - Conocer los rasgos estructurales de los nanomateriales, incluyendo las principales técnicas para su identificación y caracterización	A5		
CE7 - Interpretar los datos obtenidos mediante medidas experimentales y simulaciones, incluyendo el uso de herramientas informáticas, identificar su significado y relacionarlos con las teorías químicas, físicas o biológicas apropiadas.	A7		
CB2 - Que los estudiantes sepan aplicar sus conocimientos a su trabajo o vocación de una forma profesional y posean las competencias que suelen demostrarse por medio de la elaboración y defensa de argumentos y la resolución de problemas dentro de su área de estudio		B2	
CB3 - Que los estudiantes tengan la capacidad de reunir e interpretar datos relevantes (normalmente dentro de su área de estudio) para emitir juicios que incluyan una reflexión sobre temas relevantes de índole social, científica o ética		B3	
CB4 - Que los estudiantes puedan transmitir información, ideas, problemas y soluciones a un público tanto especializado como no especializado		B4	
CB5 - Que los estudiantes hayan desarrollado aquellas habilidades de aprendizaje necesarias para emprender estudios posteriores con un alto grado de autonomía		B5	
CG1 - Aprender a aprender		B6	

CG2 - Resolver problemas de forma efectiva.		B7	
CG3 - Aplicar un pensamiento crítico, lógico y creativo.		B8	
CG4 - Trabajar de forma autónoma con iniciativa.		B9	
CG5 - Trabajar de forma colaborativa.		B10	
CG7 - Comunicarse de manera efectiva en un entorno de trabajo.		B12	
CT1 - Expresarse correctamente, tanto de forma oral coma escrita, en las lenguas oficiales de la comunidad autónoma			C1
CT3 - Utilizar las herramientas básicas de las tecnologías de la información y las comunicaciones (TIC) necesarias para el ejercicio de su profesión y para el aprendizaje a lo largo de su vida			C3
CT7 - Desarrollar la capacidad de trabajar en equipos interdisciplinares o transdisciplinares, para ofrecer propuestas que contribuyan a un desarrollo sostenible ambiental, económico, político y social.			C7
CT8 - Valorar la importancia que tiene la investigación, la innovación y el desarrollo tecnológico en el avance socioeconómico y cultural de la sociedad			C8
CG6 - Comportarse con ética y responsabilidad social como ciudadano/a y como profesional.		B11	

Contidos	
Temas	**Subtemas**
Metodoloxía ab initio (Hartree-Fock e post-HF)	Xeneralidades sobre simulación molecular. Fundamento e aproximacións iniciais. Método Hartree-Fock. Ecuacións de Roothan. Funcións de base. Error de superposición de bases (BSSE). A enerxía de correlación. Interacción de configuracións. Métodos Møller-Plesset (MPx). Métodos clústeres acoplados. Métodos multiconfiguracionais autoconsistentes. Estados excitados. Métodos QM/MM. Uso de programas para cálculos ab initio. Análise crítico dos resultados.
Teoría do funcional da densidade (DFT): aproximación de Kohn-Sham	Teoremas e ecuacións fundamentais (Hohenberg-Kohn e Kohn-Sham). Funcional de intercambio-correlación. A escaleira de Jacob (aproximacións: densidade local, gradiente xeneralizado e metagradiente xeneralizado; funcionais dependentes dos orbitais e intercambio exacto; funcionais híbridos). TD-DFT. Uso de programas para cálculos DFT. Análise crítico dos resultados.
Simulacións de dinámica molecular	Ecuacións do movemento (algoritmo de Verlet). Colectivos. Potenciais de interacción. Funcións de correlación. Traxectorias. Cálculo de propiedades. Acoplamento molecular. Dinámica molecular ab initio. Uso de programas de dinámica e acoplamento molecular. Análise crítico dos resultados.
Métodos de simulación do medio: sistemas periódicos	Modelización do disolvente. Hartree-Fock, post-HF, DFT e dinámica molecular en sistemas periódicos. Aplicación a materiais nanoestruturados: grafeno, carburos e carbón, interfases metal/óxido e moléculas sobre superficies. Análise crítico dos resultados.
Métodos numéricos para nanotecnoloxía computacional	-Introducción ao método dos elementos finitos. Método de Ritz-Galerkin. Formulación variacional. Elementos finitos dimensión 1. Formulación variacional do problema de valores propios e funcións propias. Aplicación ao cálculo de enerxía mediante o método dos elementos finitos. Elementos finitos de maior dimensión. - Introdución ao método Montecarlo. Procesos estocásticos: procesos markovianos. Método Metropolis (MCM, Markov Chained Monte Carlo).

Planificación				
Metodoloxías / probas	**Competencias / Resultados**	**Horas lectivas (presenciais e virtuais)**	**Horas traballo autónomo**	**Horas totais**

Seminario	A1 A2 A3 A5 A7 B2 B3 B6 B7 B8 B9 B10 B12	8	12	20
Proba de resposta múltiple	A1 A2 A3 A5 A7 B2 B8 C3	1	2	3
Estudo de casos	A1 A2 A3 A5 A7 B2 B3 B4 B5 B6 B7 B8 B9 B10 C3 C7 C8	2	7	9
Glosario	A1 A5 B3 B4 B5 B6 B8 B9 B10 B12 C1 C3	0	3	3
Portafolios do alumno	A1 A2 A3 A5 A7 B2 B3 B4 B5 B6 B7 B8 B9 B10 B12 C1 C3 C7	6	0	6
Prácticas de laboratorio	A2 A3 A7 B5 B6 B7 B8 B9 B10 B11 C3 C8	15	0	15
Proba práctica	A1 A2 A3 A5 A7 B3 B4 B7 B8 B11	2	4	6
Presentación oral	A7 B2 B3 B4 B12 C1	1	3	4
Sesión maxistral	A1 A5	28	56	84
Atención personalizada		2	0	2
***Os datos que aparecen na táboa de planificación son de carácter orientativo, considerando a heteroxeneidade do alumnado**				

Metodoloxías	
Metodoloxías	**Descrición**
Seminario	? Permiten o/a profesor/a coñecer o grao e os erros de aprendizaxe, as carencias e limitacións no uso das ferramentas de traballo. ? Plantearanse casos prácticos e/ou resolveranse dúbidas. ? Realizaranse prácticas TIC ? Poderán realizarse probas tipo test. ? As actividades que se realicen poderán ser en grupo e/ou individuais. ? Implica a participación activa d@s estudantes.
Proba de resposta múltiple	O longo do curso realizaranse unha serie de probas para avaliar a aprendizaxe dos conceptos, destrezas, competencias e habilidades asociados á asignatura. Esta actividade pode implicar o emprego de plataformas como o Campus Virtual, ferramentas a dispor no paquete Office365 e/ou aplicacións dispoñibles en Internet.
Estudo de casos	? Trátase dunha estratexia de aprendizaxe activo. ? A partires da presentación dun caso, @s estudantes deberán elaborar unha ou varias hipóteses, aplicar a(s) correspondente(s) teoría(s), describir e rexistar os feitos do caso, realizar cálculos, comprobar e/ou comparar, no seu caso, con casos similares.
Glosario	? Emprégase como estratexia de aprendizaxe activo. ? @ estudante deberá seleccionar, estruturar e secuenciar o contido da asignatura.
Portafolios do alumno	? Permite recoller evidencias do aprendido resultado de diferentes actividades realizadas polo/a estudante. ? Búscase que @ estudante participe de xeito activo implicándose no seu propio proceso de aprendizaxe.

Prácticas de laboratorio	? Implican tanto o uso do superordenador do Centro de Computación de Galicia (CESGA) como de aplicacións a dispor no aula de informática e/ou en Internet. ? Realizaranse no aula de informática nos días e horas que establece o correspondente calendario, en grupos preferentemente de non mais de 10 estudantes. ? O remate das mesmas, e nas datas establecidas, deberá entregarse o correspondente informe co contido, formato e medio que se indique.
Proba práctica	Proba final implicando a resolución de problemas e/ou análise crítico de material obtido en cálculos relacionados cos contidos da asignatura. Trátase de que @s estudantes evidencien o seu aproveitamento, de forma práctica, da asignatura.
Presentación oral	Exposición oral dun traballo preparado en grupo sobre as prácticas de laboratorio, proposto pol@ profesor/a. Na actividade se inclúe un debate posterior sobre o tema obxecto da presentación.
Sesión maxistral	? Duración de aproximadamente cincuenta minutos e impartiranse no horario aprobado pola Xunta de Facultade. ? As sesións serán do tipo lección maxistral nas que o/a profesor/a presentará os temas da asignatura co apoio, de selo caso, dos medios audiovisuales necesarios, indicando @s alumn@s o máis importante a ter en conta á hora do estudio e recomendándolles capítulos de libros, e/ou outros materiais, adecuados para a súa maior comprensión. ? Incentivarase a participación d@ estudante nas clases, o que pode incluir a realización de tests. ? O/a profesor/a facilitará o acceso d@s estudantes o material audiovisual utilizado nas sesións, así como outro tipo de material complementario, para que lles sirva na súa aprendizaxe. O acceso os devanditos materiais será ben a través do Campus Virtual da Universidade ou de aplicacións similares.

Atención personalizada	
Metodoloxías	**Descrición**
Estudo de casos Portafolios do alumno Presentación oral	Resolveranse as dúbidas que poida ter o/a estudante en canto á teoría impartida nas leccións maxistrais, igualmente no que atinxe os contidos dos seminarios, así como para o resto das actividades. Igualmente orientarase @ estudante, de xeito persoalizado, na estratexia de estudo da asignatura. As titorías, en grupo ou personais, poderán realizarse presencialmente ou a través da aplicación TEAMS (ou aplicacións similares), do Campus Virtual e/ou correo electrónico.

Avaliación			
Metodoloxías	**Competencias / Resultados**	**Descrición**	**Cualificación**
Seminario	A1 A2 A3 A5 A7 B2 B3 B6 B7 B8 B9 B10 B12	Valórase a participación resolvendo problemas, prantexando dúbidas, e respostando cuestións que indique o/a profesor/a. así como a entrega dos exercicios e a realización das actividades propostas, tanto on-line como off-line. É obrigatorio ter realizado alomenos o 50% das actividades propostas.	35
Proba de resposta múltiple	A1 A2 A3 A5 A7 B2 B8 C3	O longo do curso plantearanse este tipo de probas, ON LINE, co gallo de coñecer o grao de adquisición de coñecementos relativos o contido da asignatura.	5
Estudo de casos	A1 A2 A3 A5 A7 B2 B3 B4 B5 B6 B7 B8 B9 B10 C3 C7 C8	Plantearanse casos reais que haberán de ser analizados críticamente en relación cos contidos da asignatura.	10
Glosario	A1 A5 B3 B4 B5 B6 B8 B9 B10 B12 C1 C3	Valorarase a confección do glosario como instrumento de ràpido acceso a termos relevantes na asignatura.	10
Portafolios do alumno	A1 A2 A3 A5 A7 B2 B3 B4 B5 B6 B7 B8 B9 B10 B12 C1 C3 C7	Á hora de valora-lo considerarase tanto o número como a calidade das actividades, relacionadas coa asignatura propostas polo profesorado, que conteña.	10

Prácticas de laboratorio	A2 A3 A7 B5 B6 B7 B8 B9 B10 B11 C3 C8	? Asistencia obrigatoria. A non asistencia ás prácticas de laboratorio supón o suspenso na asignatura. En casos moi xustificados pódese suplir a asistencia mediante a realización dun exame práctico relacionado coas prácticas non realizadas. ? Valorarase a aprendizaxe do manexo de superordenador do CESGA e a realización de cálculos, directamente relacionados co contido da asignatura, en diversos programas e aplicacións informáticas. ? Forma parte da avaliación un informe coa análise crítico dos resultados obtidos nas prácticas.	10
Proba práctica	A1 A2 A3 A5 A7 B3 B4 B7 B8 B11	Proporase unha ou máis situacións onde haberá que aplicar, de xeito práctico, contidos da asignatura, ademáis de chegar a un resultado concreto valorarase tamén a súa análise crítica. A realización da proba práctica é obrigatoria.	10
Presentación oral	A7 B2 B3 B4 B12 C1	A presentación oral, actividade grupal e obrigatoria, versará sobre unha das prácticas de laboratorio e/ou sobre o estudo dun caso, terase en conta: ? Calidade da información contida na presentación. ? Habilidades amosadas na presentación. ? Capacidade para defende-lo traballo presentado.	10

Observacións avaliación

A non participación en calquera das actividades sinaladas como obrigatorias, incluido o establecido relativo os seminarios, implica o suspenso na asignatura. A cualificación que figurará no acta será como máximo 4.9 (sobre 10) sempre que a media ponderada considerando tódalas actividades avaliables produza un valor superior a cinco sobre dez.
Para que as actividades avaliables, agás a proba práctica, participen na cualificación final é preciso obter unha cualificación mínima de catro sobre dez na proba práctica. Cumplido ese requisito o aprobado da asignatura, en calquera de ambas oportunidades, sitúase nunha cualificación mínima de cinco sobre dez tendo en conta as cualificacións de tódalas actividades avaliables coa ponderación indicada nesta guía docente. Caso de non alcanzar a cualificación mínima de catro sobre dez, na proba práctica, a cualificación que figurará no acta será como máximo 4.9 (sobre 10) sempre que a media ponderada considerando tódalas actividades avaliables produza un valor superior a cinco sobre dez.
@s estudantes que non aprobaren na primeira oportunidade conservan, para a segunda oportunidade, as cualificacións obtidas nas actividades avaliables agás a da proba práctica.
Na convocatoria extraordinaria de Decembro aplícase o indicado para a segunda oportunidade.
@s estudantes que acaden na proba práctica unha cualificación mínima de 4 sobre 10 e que a súa media ponderada sexa inferior a 5.0 sobre 10, excepcionalmente e segundo o criterio do profesorado da asignatura, poderán someter a valoración unha nova versión de outra(s) actividade(s) avaliable(s) -decididas polo profesorado-. Neste caso @ estudante se lle solicitará a realización e entrega do devandito material fora do período de exames da correspondente oportunidade, isto sempre que os prazos razoablemente o permitan.
Cualquier estudante considerase como presentad@ sempre que teña realizado actividades avaliables que representen máis do corenta por cento da nota global.
Por lo que atinxe a sucesivos cursos académicos, o proceso de ensinanza-aprendizaxe, incluída a avaliación, refírese a un curso académico, e, polo tanto, tódaslas actividades deben de volver a realizarse co novo curso.
Durante a realización da proba práctica, en calquera de ambas oportunidades, agás que se indique o contrario, está prohibido o uso de cualquera dispositivo con acceso a Internet. Pese a que non se aconsella traer ditos dispositivos á devandita actividade, poderá habilitarse un espazo para o seu almacenamento, sen que elo implique ningún tipo de responsabilidade de custodia por parte da UDC, da Escola ou dos profesores presentes durante a proba obxectiva.
Todos os aspectos relacionados con ?dispensa académica?, ?dedicación ao estudo?, ?permanencia? e ?fraude académica? rexeranse de acordo coa normativa académica vixente da UDC.?
No que atinxe a perspectiva de xénero estarase en líña coa filosofía e a práctica proposta pola UDC.

Fontes de información

Bibliografía básica	- Kurt Binder, Dieter W. Heermann (2019). Monte Carlo Simulation in Statistical Physics: An Introduction. 6th ed.. Springer (Graduate Texts in Physics) - Anosh Joseph (2020). Markov Chain Monte Carlo Methods in Quantum Field Theories A Modern Primer. Springer - EMMANUEL GOBET (2016). Monte-Carlo Methods and Stochastic Processes From Linear to Non-Linear. CRC Press - Hans Petter Langtangen , Kent-Andre Mardal (2019). Introduction to Numerical Methods for Variational Problems (http://hplgit.github.io/INF5620/doc/pub/H14/fem/html/main_fem.html). Springer - Jorge Kohanoff (2006). Electronic structure calculations for solids and molecules : theory and computational methods / Jorge Kohanoff. Cambridge University Press - Kálmán Varga, Joseph A. Driscoll. (2011). Computational nanoscience: applications for molecules, clusters, and solids. Cambridge University Press - Jean Demaison, James E. Boggs, Attila G. Csaszar (2010). Equilibrium molecular structures: from spectroscopy to quantum chemistry. CRC Press - Prof. Dr. Wolfram Koch, Dr. Max C. Holthausen (2001). A Chemist's Guide to Density Functional Theory. Wiley-VCH Verlag GmbH - Charles M. Quinn (2002). Computational quantum chemistry an interactive guide to basis set theory. Academic Press - David S., Steckel, Janice A. (2009). Density Functional Theory: A Practical Introduction. John Wiley & Sons, Inc. - Jensen, Frank (2007). Introduction to computational chemistry. John Wiley & Sons - Cram101 Textbook Reviews (2013). Studyguide for introduction to computational chemistry by Jensen, Frank. Content Technologies, Inc. - Amarjitsing Rajput, Ganesh Shevalkar, Krutika Pardeshi, Prashant Pingale (2023). Computational nanoscience and technology . OpenNano
Bibliografía complementaria	- G. Ciarlet (1978). The Finite Element Method for Elliptic Problems. North Holland - Tao Pang (2012). An Introduction to Computational Physics. Cambridge University Press - Mats G. Larson, Fredrik Bengzon (2010). The Finite Element Method: Theory, Implementation, and Practice. Springer - JOS THIJSSEN (2007). COMPUTATIONAL PHYSICS. Cambridge University Press - Juan Andrés Bort (2001). Química teórica y computacional. Publicaciones de la Universitat Jaume I

Recomendacións
Materias que se recomenda ter cursado previamente

Técnicas de Caracterización de Nanomateriais 2/610G04030 Técnicas de Caracterización de Nanomateriais 1/610G04025 Cinética e Catálise/610G04026 Química Supramolecular/610G04027 Termodinámica: Equilibrio e Fases/610G04018 Bioquímica Estrutural/610G04019 Ciencia de Superficies/610G04021 Estado Sólido/610G04022 Bioquímica Molecular e Metabólica/610G04023 Métodos Numéricos e Estatísticos/610G04013 Fundamentos de Cuántica/610G04015 Ecuacións Diferenciais /610G04016 Espectroscopía/610G04017 Electricidade e Magnetismo/610G04007 Fundamentos de Matemáticas/610G04001 Ampliación de Cálculo/610G04009 Cristalografía e Simetría/610G04006 Fundamentos de Informática/610G04010
Materias que se recomenda cursar simultaneamente
Máquinas Moleculares/610G04036 Física na Nanoescala/610G04041
Materias que continúan o temario
Traballo Fin de Grao/610G04047
Observacións
Perspectiva de xénero: tal e como se recolle nas competencias transversais do título, fomentarase o desenvolvemento dunha cidadanía crítica, aberta e respectuosa coa diversidade na nosa sociedade, salientando a igualdade de dereitos do alumnado sen discriminación por cuestión de xénero ou condición sexual. Empregarase unha linguaxe inclusiva no material e no desenvolvemento das sesións.Traballarase para identificar e modificar prexuizos e actitudes sexistas e influirase na contorna para modificalos e fomentar valores de respecto e igualdade.

(*)A Guía docente é o documento onde se visualiza a proposta académica da UDC. Este documento é público e non se pode modificar, salvo casos excepcionais baixo a revisión do órgano competente dacordo coa normativa vixente que establece o proceso de elaboración de guías