



## Teaching Guide

Identifying Data				2024/25
Subject (*)	Computational Nanoscience and Nanotechnology	Code	610G04034	
Study programme	Grao en Nanociencia e Nanotecnoloxía			
Descriptors				
Cycle	Period	Year	Type	Credits
Graduate	1st four-month period	Fourth	Obligatory	6
Language	SpanishGalicianEnglish			
Teaching method	Face-to-face			
Prerequisites				
Department	MatemáticasQuímica			
Coordinador	Santaballa Lopez, Juan Arturo	E-mail	arturo.santaballa@udc.es	
Lecturers	Ferreiro Ferreiro, Ana María García Rodríguez, José Antonio Rodríguez Ramos, Daniel Santaballa Lopez, Juan Arturo	E-mail	ana.fferreiro@udc.es jose.garcia.rodriguez@udc.es danielr@udc.es arturo.santaballa@udc.es	
Web	Campus Virtual / TEAMS da asignatura			
General description	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.			

## Study programme competences / results

Code	Study programme competences / results
A1	CE1 - Comprender los conceptos, principios, teorías y hechos fundamentales relacionados con la Nanociencia y Nanotecnología.
A2	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.
A3	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.
A5	CE5 - Conocer los rasgos estructurales de los nanomateriales, incluyendo las principales técnicas para su identificación y caracterización
A7	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.
B2	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
B3	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
B4	CB4 - Que los estudiantes puedan transmitir información, ideas, problemas y soluciones a un público tanto especializado como no especializado
B5	CB5 - Que los estudiantes hayan desarrollado aquellas habilidades de aprendizaje necesarias para emprender estudios posteriores con un alto grado de autonomía
B6	CG1 - Aprender a aprender
B7	CG2 - Resolver problemas de forma efectiva.
B8	CG3 - Aplicar un pensamiento crítico, lógico y creativo.
B9	CG4 - Trabajar de forma autónoma con iniciativa.
B10	CG5 - Trabajar de forma colaborativa.
B11	CG6 - Comportarse con ética y responsabilidad social como ciudadano/a y como profesional.
B12	CG7 - Comunicarse de manera efectiva en un entorno de trabajo.
C1	CT1 - Expresarse correctamente, tanto de forma oral como escrita, en las lenguas oficiales de la comunidad autónoma



C3	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
C7	CT7 - Desarrollar la capacidad de trabajar en equipos interdisciplinarios o transdisciplinarios, para ofrecer propuestas que contribuyan a un desarrollo sostenible ambiental, económico, político y social.
C8	CT8 - Valorar la importancia que tiene la investigación, la innovación y el desarrollo tecnológico en el avance socioeconómico y cultural de la sociedad

Learning outcomes		
Learning outcomes	Study programme competences / results	
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 como 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 interdisciplinarios o transdisciplinarios, 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

Contents	
Topic	Sub-topic



Ab initio methodology (Hartree-Fock and post-HF)	Fundamentals and initial approaches. Hartree-Fock method. Roothan equations. Basis functions. Basis superposition error (BSSE). Correlation energy. Interaction of configurations. Møller-Plesset (MPx) methods. Coupled clustering methods. Self-consistent multiconfiguration methods. QM/MM methods. Use of programs for ab initio calculations. Critical analysis of the results.
Density functional theory: Kohn-Sham approximation	Theorems and fundamental equations (Hohenberg-Kohn and Kohn-Sham). Exchange-correlation functional. Jacob's ladder (approximations: local density, generalized gradient and generalized metagradient; orbital-dependent and exact exchange functionals; hybrid functionals). Excited states (TD-DFT). Use of programs for DFT calculations. Critical analysis of the results.
Molecular dynamics simulations	Molecular simulation in general. Equations of motion (Verlet's algorithm). Collectives. Interaction potentials. Correlation functions Trajectories. Calculation of properties Molecular coupling. Ab initio molecular dynamics. Use of molecular dynamics and docking programs. Critical analysis of the results.
Medium simulation methods: periodic systems	Solvent modeling. Hartree-Fock, post-HF, DFT and molecular dynamics in periodic systems. Application to nanostructured materials: graphene, carbides and carbon, metal/oxide interfaces and molecules on surfaces. Critical analysis of the results.
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.  - Introducción ao método Montecarlo. Procesos estocásticos: procesos markovianos. Método Metropolis (MCM, Markov Chained Monte Carlo).

Planning				
Methodologies / tests	Competencies / Results	Teaching hours (in-person & virtual)	Student?s personal work hours	Total hours
Seminar	A1 A2 A3 A5 A7 B2 B3 B6 B7 B8 B9 B10 B12	8	12	20
Multiple-choice questions	A1 A2 A3 A5 A7 B2 B8 C3	1	2	3
Case study	A1 A2 A3 A5 A7 B2 B3 B4 B5 B6 B7 B8 B9 B10 C3 C7 C8	2	7	9
Glossary	A1 A5 B3 B4 B5 B6 B8 B9 B10 B12 C1 C3	0	3	3
Student portfolio	A1 A2 A3 A5 A7 B2 B3 B4 B5 B6 B7 B8 B9 B10 B12 C1 C3 C7	6	0	6
Laboratory practice	A2 A3 A7 B5 B6 B7 B8 B9 B10 B11 C3 C8	15	0	15
Practical test:	A1 A2 A3 A5 A7 B3 B4 B7 B8 B11	2	4	6
Oral presentation	A7 B2 B3 B4 B12 C1	1	3	4
Guest lecture / keynote speech	A1 A5	28	56	84



Personalized attention		2	0	2
(*)The information in the planning table is for guidance only and does not take into account the heterogeneity of the students.				

Methodologies	
Methodologies	Description
Seminar	<p>? Permiten o/a profesor/a coñecer o grao e os erros de aprendizaxe, as carencias e limitacións no uso das ferramentas de traballo.</p> <p>? Plantearanse casos prácticos e/ou resolveranse dúbidas.</p> <p>? Realizaranse prácticas TIC</p> <p>? Poderán realizarse probas tipo test.</p> <p>? As actividades que se realicen poderán ser en grupo e/ou individuais.</p> <p>? Implica a participación activa d@s estudantes.</p>
Multiple-choice questions	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.
Case study	<p>? Trátase dunha estratexia de aprendizaxe activo.</p> <p>? 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.</p>
Glossary	<p>? Emprégase como estratexia de aprendizaxe activo.</p> <p>? @ estudante deberá seleccionar, estruturar e secuenciar o contido da asignatura.</p>
Student portfolio	<p>? Permite recoller evidencias do aprendido resultado de diferentes actividades realizadas polo/a estudante.</p> <p>? Búscase que @ estudante participe de xeito activo implicándose no seu propio proceso de aprendizaxe.</p>
Laboratory practice	<p>? 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.</p> <p>? Realizaranse no aula de informática nos días e horas que establece o correspondente calendario, en grupos preferentemente de non mais de 10 estudantes.</p> <p>? O remate das mesmas, e nas datas establecidas, deberá entregarse o correspondente informe co contido, formato e medio que se indique.</p>
Practical test:	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.
Oral presentation	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.
Guest lecture / keynote speech	<p>? Duración de aproximadamente cincuenta minutos e impartiranse no horario aprobado pola Xunta de Facultade.</p> <p>? 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 audiovisuais 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.</p> <p>? Incentivarase a participación d@ estudante nas clases, o que pode incluír a realización de tests.</p> <p>? 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.</p>

Personalized attention	
Methodologies	Description



Case study Student portfolio Oral presentation	<p>Doubts will be answered about the theory taught in the lectures, as well as about the content of the seminars and the rest of the activities.</p> <p>Students will receive personalised guidance on the study strategy for the subject.</p> <p>In group or personal, the tutorials can be done in person or through TEAMS (or similar apps), Campus Virtual and/or email.</p>
--	--

Assessment			
Methodologies	Competencies / Results	Description	Qualification
Seminar	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
Multiple-choice questions	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
Case study	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
Glossary	A1 A5 B3 B4 B5 B6 B8 B9 B10 B12 C1 C3	Valorarase a confección do glosario como instrumento de rápido acceso a termos relevantes na asignatura.	10
Student portfolio	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
Laboratory practice	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
Practical test:	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, ademais de chegar a un resultado concreto valorarase tamén a súa análise crítica. A realización da proba práctica é obrigatoria.	10
Oral presentation	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

### Assessment comments



A non participación en calquera das actividades sinaladas como obrigatorias, incluído 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 avaliáveis produza un valor superior a cinco sobre dez.

Para que as actividades avaliáveis, 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 avaliáveis 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 avaliáveis 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 avaliáveis agás a da proba práctica.

@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) avaliábel(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 estudiante considerase como presentad@ sempre que teña realizado actividades avaliáveis 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, tódalas 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 calquera 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.



<b>Basic</b>	<ul style="list-style-type: none"><li>- Kurt Binder, Dieter W. Heermann (2019). Monte Carlo Simulation in Statistical Physics: An Introduction. 6th ed.. Springer (Graduate Texts in Physics)</li><li>- Anosh Joseph (2020). Markov Chain Monte Carlo Methods in Quantum Field Theories A Modern Primer. Springer</li><li>- EMMANUEL GOBET (2016). Monte-Carlo Methods and Stochastic Processes From Linear to Non-Linear. CRC Press</li><li>- Hans Petter Langtangen , Kent-Andre Mardal (2019). Introduction to Numerical Methods for Variational Problems (<a href="http://hplgit.github.io/INF5620/doc/pub/H14/fem/html/main_fem.html">http://hplgit.github.io/INF5620/doc/pub/H14/fem/html/main_fem.html</a>). Springer</li><li>- Jorge Kohanoff (2006). Electronic structure calculations for solids and molecules : theory and computational methods / Jorge Kohanoff. Cambridge University Press</li><li>- Kálmán Varga, Joseph A. Driscoll. (2011). Computational nanoscience: applications for molecules, clusters, and solids. Cambridge University Press</li><li>- Jean Demaison, James E. Boggs, Attila G. Csaszar (2010). Equilibrium molecular structures: from spectroscopy to quantum chemistry. CRC Press</li><li>- Prof. Dr. Wolfram Koch, Dr. Max C. Holthausen (2001). A Chemist's Guide to Density Functional Theory. Wiley-VCH Verlag GmbH</li><li>- Charles M. Quinn (2002). Computational quantum chemistry an interactive guide to basis set theory. Academic Press</li><li>- David S., Steckel, Janice A. (2009). Density Functional Theory: A Practical Introduction. John Wiley &amp; Sons, Inc.</li><li>- Jensen, Frank (2007). Introduction to computational chemistry. John Wiley &amp; Sons</li><li>- Cram101 Textbook Reviews (2013). Studyguide for introduction to computational chemistry by Jensen, Frank. Content Technologies, Inc.</li><li>- Amarjitsing Rajput, Ganesh Shevalkar, Krutika Pardeshi, Prashant Pingale (2023). Computational nanoscience and technology . OpenNano</li></ul>
<b>Complementary</b>	<ul style="list-style-type: none"><li>- G. Ciarlet (1978). The Finite Element Method for Elliptic Problems. North Holland</li><li>- Tao Pang (2012). An Introduction to Computational Physics. Cambridge University Press</li><li>- Mats G. Larson, Fredrik Bengzon (2010). The Finite Element Method: Theory, Implementation, and Practice. Springer</li><li>- JOS THIJSSSEN (2007). COMPUTATIONAL PHYSICS. Cambridge University Press</li><li>- Juan Andrés Bort (2001). Química teórica y computacional. Publicaciones de la Universitat Jaume I</li></ul>

## Recommendations

Subjects that it is recommended to have taken before



Techniques of Characterisation of Nanomaterials 2/610G04030  
Techniques of Characterisation of Nanomaterials 1/610G04025  
Kinetic and Catalysis/610G04026  
Supramolecular Chemistry/610G04027  
Thermodynamics: Equilibrium and Phases/610G04018  
Structural Biochemistry/610G04019  
Surface Science/610G04021  
Solid State/610G04022  
Molecular and Metabolic Biochemistry/610G04023  
Numerical and Statistical Methods/610G04013  
Fundamentals of Quantum Theory/610G04015  
Differential Equations/610G04016  
Spectroscopy/610G04017  
Physics: Electricity and Magnetism/610G04007  
Fundamentals of Mathematics/610G04001  
Advanced Calculus /610G04009  
Crystallography and Symmetry/610G04006  
Fundamentals of Computing Science/610G04010

**Subjects that are recommended to be taken simultaneously**

Molecular Machines/610G04036  
Physics of the Nanoscale/610G04041

**Subjects that continue the syllabus**

Final Year Dissertation/610G04047

**Other comments**

Perspectiva de xénero: tal e como se recolle nas competencias transversais do título, fomentárase 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 prexuízos e actitudes sexistas e influirase na contorna para modificalos e fomentar valores de respecto e igualdade.

(\* )The teaching guide is the document in which the URV publishes the information about all its courses. It is a public document and cannot be modified. Only in exceptional cases can it be revised by the competent agent or duly revised so that it is in line with current legislation.