

Titulación	Tipo	Curso
2501922 Nanociencia y Nanotecnología	OB	3

Contacto

Nombre: Agusti Lledos Falco

Correo electrónico: agusti.lledos@uab.cat

Idiomas de los grupos

Puede consultar esta información al [final](#) del documento.

Prerrequisitos

Es aconsejable haber aprobado las asignaturas "Enlace Químico y Estructura de la Materia", "Mecánica y Ondas" y "Física Clásica".

Objetivos y contextualización

Adquisición de conocimientos básicos de Mecánica Cuántica y de su aplicación para simular y analizar las propiedades de la materia a escala nanoscópica. El curso está organizado en tres unidades. En la primera se introducen los fundamentos de la descripción cuántica de la materia. En la segunda unidad se desarrollan estos fundamentos para convertirlos, introduciendo aproximaciones, en una potente herramienta para el cálculo de sistemas reales. En la tercera parte se muestra la aplicación de métodos basados en la Mecánica Cuántica para la simulación de sistemas nanoscópicos.

Competencias

- Aplicar los conceptos, principios, teorías y hechos fundamentales relacionados con la Nanociencia y Nanotecnología a la resolución de problemas de naturaleza cuantitativa o cualitativa en el ámbito de la Nanociencia y Nanotecnología.
- Aprender de forma autónoma.
- Comunicarse de forma oral y escrita en la lengua nativa.
- Demostrar que comprende los conceptos, principios, teorías y hechos fundamentales relacionados con la Nanociencia y Nanotecnología.
- Gestionar la organización y planificación de tareas.
- Interpretar los datos obtenidos mediante medidas experimentales, incluyendo el uso de herramientas informáticas, identificar su significado y relacionarlos con las teorías químicas, físicas o biológicas apropiada.
- Obtener, gestionar, analizar, sintetizar y presentar información, incluyendo la utilización de medios telemáticos e informáticos.
- Proponer ideas y soluciones creativas.
- Razonar de forma crítica.

- Reconocer los términos relativos al ámbito de la Física, Química y Biología, así como a la Nanociencia y la Nanotecnología en lengua inglesa y utilizar eficazmente el inglés en forma escrita y oral en su ámbito laboral.
- Reconocer y analizar problemas físicos, químicos y biológicos en el ámbito de la Nanociencia y Nanotecnología, plantear respuestas o trabajos adecuados para su resolución, incluyendo en casos necesarios el uso de fuentes bibliográficas.
- Resolver problemas y tomar decisiones.

Resultados de aprendizaje

1. Analizar situaciones y problemas en el ámbito de la física y plantear respuestas o trabajos de tipo experimental utilizando fuentes bibliográficas.
2. Aplicar la ecuación de Schrödinger a sistemas cuánticos unidimensionales como pozos de potencial y/o osciladores y a tridimensionales como moléculas.
3. Aplicar los contenidos teóricos adquiridos a la explicación de fenómenos experimentales.
4. Aprender de forma autónoma.
5. Comunicarse de forma oral y escrita en la lengua nativa.
6. Emplear la tecnología de la información y la comunicación para la documentación de casos y problemas.
7. Evaluar resultados experimentales de forma crítica y deducir su significado.
8. Exponer breves informes sobre la materia en inglés.
9. Gestionar la organización y planificación de tareas.
10. Indicar las bases físicas de la mecánica cuántica y relacionarlas con hechos experimentales.
11. Interpretar textos y bibliografía en inglés sobre Física y materiales a nivel básico.
12. Obtener, gestionar, analizar, sintetizar y presentar información, incluyendo el uso de medios telemáticos e informáticos.
13. Proponer ideas y soluciones creativas.
14. Razonar de forma crítica.
15. Realizar búsquedas bibliográficas de documentación científica.
16. Reconocer en procesos físico-químicos los fenómenos de intercambios de energía y las leyes que los gobiernan.
17. Reconocer la dualidad onda-partícula.
18. Reconocer los términos relativos a la Física y los materiales.
19. Redactar informes sobre la materia en inglés.
20. Relacionar las propiedades de los átomos y moléculas con la Mecánica Cuántica.
21. Resolver la ecuación de Schrödinger para problemas unidimensionales y ser capaz de calcular el efecto túnel en diversos sistemas físicos.
22. Resolver problemas con la ayuda de bibliografía complementaria proporcionada.
23. Resolver problemas y tomar decisiones.
24. Utilizar correctamente las herramientas informáticas necesarias para calcular, representar gráficamente e interpretar los datos obtenidos, así como su calidad.
25. Utilizar programas de tratamiento de datos para elaborar informes.

Contenido

I. Fundamentos

Introducción histórica

1.1 Modelo de Bohr

1.2 Dualidad onda-partícula

1.3 Elementos de matemáticas

1.4 Postulados de la Mecánica Cuántica

1.5 Principio de Incertidumbre de Heisenberg

Aplicación a sistemas con solución analítica

1.6 Partícula en una caja

1.7 Oscilador armónico

1.8 Rotor rígido

1.9 Átomo de hidrógeno

1.10 Momento angular

1.11 Orbitales atómicos

1.12 Spin

II. Maquinaria

2.1 Átomos polielectrónicos (el átomo de helio)

2.2 Antisimetría: Principio de Pauli

2.3 Determinantes de Slater

2.4 Métodos aproximados: Teoría de Variaciones y Teoría de Perturbaciones

2.5 Estructura electrónica molecular

2.6 Aproximación de Born-Oppenheimer

2.7 Aproximación de Orbitales Moleculares (OM)

2.8 El método autoconsistente de Hartree Fock (HF-SCF)

2.9 Bases de orbitales atómicos

2.10 Correlación electrónica

2.11 Más allá de la aproximación Hartree-Fock: métodos post-HF

2.12 Teoría del Funcional de la Densidad (DFT)

2.13 Funcionales de intercambio-correlación

2.14 Errores y precisión en química computacional

III. Aplicaciones

3.1 Aplicación de la Mecánica Cuántica a la simulación molecular

3.2 Modelos i aproximaciones

3.3 Simulaciones atomísticas

3.4 ¿Qué se puede calcular?

3.5 Estructuras i reacciones: Superficies de Energía Potencial. Optimización de la geometría. Cálculo de propiedades moleculares

3.6 Simulación de sistemas complejos. Métodos híbridos QM/MM

3.7 Que se obtiene de los cálculos: ejemplos reales

Clases prácticas (Laboratorio computacional)

Práctica 1. Estructura electrónica molecular. Método Hartree-Fock. Conjuntos de base. Termoquímica.

Práctica 2. Interacciones supramoleculares. Métodos DFT. Influencia de la correlación electrónica i la dispersión.

Práctica 3. Simulación de reacciones químicas: superficies de energía potencial. Mínimos y estados de transición.

III. Aplicaciones

3.1 Aplicaciones de la Mecánica Cuántica. Jerarquía de métodos teóricos

3.2 Simulaciones como experimentos computacionales. Teorías y modelos. Nivel de cálculo

3.3 Estructuras y reacciones: Superficies de energía potencial. Optimización de la geometría. Cálculo de propiedades moleculares.

3.4 Simulación de sistemas complejos

Clases prácticas: Laboratorio Computacional

Sesión 1. Estructura electrónica. Método Hartree-Fock. Correlación electrónica. Métodos DFT.

Sesión 2. Optimización de geometría. Determinación de propiedades moleculares.

Sesión 3. Superficies de energía potencial. Mínimos. Energías de enlace, ensamblaje y reacción.

Sesión 4. Superficies de energía potencial. Estados de Transición. Simulación de reacciones químicas.

Actividades formativas y Metodología

Título	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
Tipo: Dirigidas			
Clases de problemas	10	0,4	1, 2, 10, 16, 17, 20, 21, 22, 23
Clases de teoría	28	1,12	2, 10, 16, 17, 20, 21
Sesiones de prácticas	12	0,48	3, 4, 7, 6, 14, 23, 25
Tipo: Supervisadas			
Presentación oral	4	0,16	1, 3, 7, 6, 8, 15, 9, 11, 12, 14, 18, 19, 22
Tipo: Autónomas			
Estudio	68	2,72	2, 4, 10, 13, 14, 16, 17, 20, 21, 22

Clases de teoría

El profesor/a explicará el contenido del programa con soporte audiovisual. Los alumnos/as dispondrán de material de soporte en el Campus Virtual de la UAB.

Clases de problemas

Las clases de problemas servirán para consolidar y llevar a la práctica los conocimientos adquiridos en las clases teóricas. Las clases de problemas se intercalarán con las clases de teoría para reforzar aspectos determinados o al acabar las unidades temáticas. El planteamiento/resolución de los ejercicios se llevará a cabo en las clases de problemas bajo la dirección del profesor. Los alumnos/as dispondrán de los enunciados de los ejercicios que deberán ir resolviendo a lo largo del curso, así como de los ejercicios resueltos, una vez se haya hecho la resolución en clase.

Sesiones de prácticas

Las sesiones de prácticas (Laboratorio Computacional) se desarrollarán en las Aulas Informáticas. Los alumnos/as utilizarán programas de cálculo que apliquen la metodología de la Mecánica Cuántica para estudiar la estructura y evolución de sistemas nanoscópicos.

Nota: se reservarán 15 minutos de una clase dentro del calendario establecido por el centro o por la titulación para que el alumnado rellene las encuestas de evaluación de la actuación del profesorado y de evaluación de la asignatura o módulo.

Evaluación

Actividades de evaluación continuada

Título	Peso	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
Exámenes escritos (parciales o recuperación)	70%	8	0,32	3, 2, 7, 5, 10, 14, 16, 17, 20, 21, 22, 23
Informes de prácticas	15%	10	0,4	3, 2, 4, 7, 5, 6, 15, 9, 10, 12, 16, 17, 20, 21, 22, 23, 24, 25
Presentación oral de un artículo	15%	10	0,4	1, 3, 2, 4, 7, 6, 8, 15, 10, 11, 12, 13, 14, 18, 16, 17, 19, 20, 21, 22, 23

Exámenes escritos

Constituyen el 70% de la nota. Se programarán dos exámenes parciales a lo largo del curso y un examen de recuperación. Los dos exámenes parciales tienen el mismo peso (35%). Se requiere una nota igual o superior a 4 (sobre 10) en cada parcial para poder superar la asignatura sin acudir al examen de recuperación. En caso de no haber alcanzado una calificación de 4 en uno o los dos parciales habrá que acudir al examen de recuperación. Este examen es exclusivamente de recuperación y abarca toda la materia del curso. Para poder participar en el examen de recuperación será obligatorio haberse presentado, como mínimo, a uno de los dos exámenes parciales, además de haber realizado las prácticas y la presentación oral. Se requiere alcanzar una nota de 4 (sobre 10) en el examen de recuperación para poder aprobar la asignatura. Podrán optar a la calificación de "Matrícula de Honor" los alumnos/as que hayan obtenido una nota igual o superior a 8 en los dos exámenes parciales.

Prácticas

Constituyen el 15% de la nota. Los alumnos/as deberán contestar las preguntas formuladas en los guiones de las prácticas. La asistencia a las sesiones de prácticas y la presentación de los informes son obligatorios.

Presentación oral de un artículo

Constituye el 15% de la nota. En las últimas semanas del curso los alumnos/as realizarán, en grupos, un trabajo consistente en buscar, en las revistas de más impacto del campo de las Nanociencias, y exponer públicamente a toda la clase, un artículo reciente en el que los cálculos cuánticos sean una parte importante de los resultados. Cada grupo dispondrá de un tiempo para la presentación y habrá también un turno de preguntas. La presentación oral es obligatoria.

Evaluación única

La asistencia a las sesiones de prácticas y la presentación de los informes es **obligatoria** para todos los alumnos/as. Además de estas dos actividades evaluables, los alumnos/as que se hayan acogido a la modalidad de evaluación única deberán realizar una prueba final que consistirá en un examen de todo el temario teórico y de problemas de la asignatura. Esta prueba se realizará el día del segundo parcial de los estudiantes de evaluación continuada. La calificación del/la estudiante acogido a la modalidad de evaluación única será:

Nota de la asignatura = $(\text{Nota de la prueba final} \cdot 70\% + \text{Nota de prácticas} \cdot 15\% + \text{Nota de la presentación oral} \cdot 15\%) / 100$

Si la nota final no llega a 5, el/la estudiante dispone de otra oportunidad para superar la asignatura mediante el examen de recuperación, que se realizará en la fecha fijada por la coordinación de la titulación. En esta prueba se podrá recuperar el 70% de la nota correspondiente a la parte de la teoría y problemas. Las otras dos actividades evaluables no son recuperables.

Bibliografía

"Quantum Chemistry" sixth edition, Ira N. Levine, Prentice Hall, 2009. ISBN: 978-0136131069. Existe una versión española de la quinta edición.

"Molecular Quantum Mechanics" fifth edition, Peter Atkins, Ronald Friedman, Oxford University Press, 2010. ISBN 019-927498-3.

"Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models", second edition, Christopher J. Cramer, Wiley, 2004. ISBN: 0 470 09181 9.

"Química Cuántica", Joan Bertran, Vicenç Branchadell, Miquel Moreno, Mariona Sodupe, Editorial Síntesis, 2000. ISBN: 84 7738 742 7.

"Introduction to Quantum Mechanics" third edition, David J. Griffiths, Darrell F. Schroeter, Cambridge University Press, 2018. ISBN: 9781107189638.

"Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods", Richard M. Martin, Cambridge University Press, 2004. ISBN: 0 521 78285 6

"Computational Chemistry", Jeremy Harvey, Oxford University Press, 2018, ISBN: 9780198755500

Software

Las prácticas del Laboratorio Computacional se llevarán a cabo con el programa Gaussian 16 para los cálculos y Gaussview 6 para la construcción y visualización de moléculas.

Lista de idiomas

Nombre	Grupo	Idioma	Semestre	Turno
(PAUL) Prácticas de aula	1	Catalán	primer cuatrimestre	tarde
(PLAB) Prácticas de laboratorio	1	Catalán	primer cuatrimestre	mañana-mixto
(PLAB) Prácticas de laboratorio	2	Catalán	primer cuatrimestre	mañana-mixto
(TE) Teoría	1	Catalán	primer cuatrimestre	tarde