

Titulación	Tipo	Curso
Nanociencia y Nanotecnología	OB	2

Profesor/a de contacto

Nombre : Xavier Solans Monfort

Correo electrónico : xavier.solans@uab.cat

Idiomas de los grupos

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

Prerrequisitos

Si bien la asignatura no tiene requisitos específicos, es muy recomendable tener aprobadas las asignaturas de "Enllaç Químic i Estructura de la Matèria", "Física General: Mecànica i Ones" i "Fonaments de matemàtiques".

Objetivos

Adquisición de conocimientos básicos de mecánica cuántica y de sus aplicaciones para simular y analizar las propiedades de la materia a la escala nanométrica. El curso está organizado en tres unidades. A la primera se introducen los fundamentos de la descripción cuántica de la materia. Una segunda unidad desarrolla, introduciendo las aproximaciones necesarias, estos fundamentos para convertirlos en una potente maquinaria para el cálculo. En la tercera parte se muestran sus aplicaciones en la simulación de sistemas nanoscópicos.

Resultados de aprendizaje

- CM16 (Aplicar los conocimientos físicos a la resolución de problemas en la nanoescala) Aplicar los conocimientos físicos a la resolución de problemas en la nanoescala
- KM29 (Reconocer los principios de la mecánica cuántica y su aplicación en la descripción de la estructura y propiedades de la materia a escala atómica y molecular.) Reconocer los principios de la mecánica cuántica y su aplicación en la descripción de la estructura y propiedades de la materia a escala atómica y molecular.
- SM27 (Aplicar las herramientas de la física cuántica y del cálculo computacional a sistemas sencillos.) Aplicar las herramientas de la física cuántica y del cálculo computacional a sistemas sencillos.
- SM28 (Reunir, sintetizar y presentar resultados y conclusiones de publicaciones científicas.) Reunir, sintetizar y presentar resultados y conclusiones de publicaciones científicas.

Contenidos

1. Fundamentos

1.1. Postulados de la mecánica cuántica

Introducción histórica. Elementos de matemáticas. Postulados de la Mecánica Cuántica. Principio de Incertidumbre de Heisenberg.

1.2. Aplicación a sistemas con solución analítica

Partícula en una Caja, Oscilador armónico, Rotor rígido

1.3. Estructura atómica.

Átomo de hidrógeno. Momento angular. Orbitales atómicos. Spin. Átomos polieletrónicos (el átomo de helio). Antisimetría: Principio de Pauli. Determinantes de Slater. Métodos aproximados: Teoría de Variaciones y Teoría de Perturbaciones

2. Estructura molecular

2.1 Métodos basados en la función de onda

Aproximación de Born-Oppenheimer. Aproximación de Orbitales Moleculares (OM). El método autoconsistente de Hartree-Fock (HF-SCF). Bases de orbitales atómicos. Más allá del método Hartree-Fock: métodos post-HF.

2.2 Teoría del Funcional de la Densidad (DFT)

Teoremas de Hohenberg y Kohn. Aproximación de Kohn-Sham. Funcionales de intercambio y correlación. Limitaciones conocidas de los métodos DFT. Errores y precisión en química computacional

3. Aplicaciones

3.1 Aplicación de la Mecánica Cuántica en la simulación molecular.

Modelos y aproximaciones. Simulaciones atomísticas. Estructuras y reacciones: Superficies de Energía Potencial. Optimización de la geometría. Cálculo de propiedades moleculares

3.2 Simulación de sistemas complejos.

Mecánica molecular. Métodos híbridos QM/MM. Simulación de materiales.

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 y la dispersión.

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

Actividades formativas y Metodología

Título	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje

Estudio	75	3
Clases de problemas	15	0,6
Prácticas computacionales	8	0,32
Clases de teoría	30	1,2

La metodología docente se basa en tres tipos de actividades: clases de teoría, clases de problemas y sesiones prácticas.

Clases de Teoría. Se trata de una asignatura de elevado contenido teórico. La teoría de la asignatura se expondrá por parte del profesorado en el aula, usando materiales de apoyo donde sea necesario. Este material estará a disposición del alumnado por adelantado mediante la plataforma Campus Virtual. Adicionalmente, se facilitará material adicional para favorecer el estudio del alumnado.

Clases de problemas. La resolución de problemas es uno de los principales objetivos de la asignatura. Al inicio del curso se distribuirá en la plataforma Campus Virtual una exhaustiva colección de problemas por todo el curso, junto con un formulario y un solucionario. En sesiones periódicas se procederá a resolver algunos de estos problemas de forma detallada y extensa en clase.

Sesiones de Prácticas. Todas las prácticas de la asignatura son prácticas de simulación y se realizan en ordenador. Se han programado tres prácticas. El alumnado utilizará software con licencia para realizar cálculos mecanocuánticos de estructura electrónica de moléculas de pequeño y mediano tamaño. En esta última serie de prácticas se estudiará la estructura molecular, reactividad a nivel termodinámico y dinámica de reacción en algunas reacciones sencillas.

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

Uso de la inteligencia artificial (IA)

Uso restringido: "Para esta asignatura, se permite el uso de tecnologías de Inteligencia Artificial (IA) exclusivamente en tareas de apoyo al estudio, búsqueda bibliográfica o de información, la corrección de textos o traducciones. Si se entrega algún documento que contenga contenido generado por IA, el estudiante tendrá que identificar claramente qué partes han sido generadas y éstas han influido en el proceso y el resultado final de la actividad. La no transparencia del uso de la IA en esta actividad evaluable se considerará falta de honestidad académica y puede comportar una penalización parcial o total en la nota de la actividad, o sanciones mayores en casos de gravedad.

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
Informes de prácticas	15%	9	0,36	SM27, SM28
Evidencias	15%	5	0,2	CM16, SM28
Exámenes	70%	8	0,32	CM16, KM29

La evaluación de la asignatura se realizará a partir de tres actividades evaluativas: exámenes escritos, informes de prácticas y evidencias. De estas tres es requisito para aprobar la asignatura haber obtenido una nota mínima de 4,5 sobre 10,0 en los exámenes escritos y un 5.0 de nota global de la asignatura. Quien no alcance esta nota mínima no aprueba la asignatura.

La nota global de la asignatura se calcula como:

Nota de la asignatura= (Parciales · 7.0 + Prácticas · 1.5 + Evidencias ·1.5)/100

· Contenidos Teóricos: Exámenes parciales (70% de la nota final)

Se programarán dos exámenes parciales escritos. Cada examen parcial tendrá el mismo peso en la nota final (35%). La nota de estos exámenes pretende reflejar los conocimientos teóricos de la materia adquiridos por el alumnado y su capacidad para aplicarlo en la resolución de problemas. En cada prueba parcial se evaluará el temario cubierto durante la parte correspondiente del curso.

El alumnado que obtenga más de un 4.5 de las dos pruebas parciales y con ello alcance un 5.0 de nota global del curso, no debe presentarse en la prueba de recuperación. En caso contrario deberá presentarse obligatoriamente en el examen de recuperación. Sin embargo, hay que tener en cuenta que para participar en la prueba de recuperación es necesario, como mínimo, que el alumno/a se haya presentado a un examen parcial, haya realizado las prácticas y entregado al menos una evidencia.

Se podrá conservar una de las dos notas parciales en el examen de recuperación si ésta es superior a 5. No se podrá asistir a esta prueba final para subir nota. Además, podrán optar a la calificación de "Matrícula de Honor" los/las alumnos/as que hayan obtenido una nota igual o superior a 8 a los dos exámenes parciales.

Contenidos Prácticos. Informes de prácticas (15% en la nota final).

La asistencia a las sesiones de prácticas es obligatoria. La nota de Contenidos Prácticos viene determinada por la corrección de los informes de prácticas. La nota final de los informes de prácticas será una media ponderada de los informes.

Esa nota no es recuperable.

Evidencias. (15% de la nota final).

A lo largo del curso se propondrá la realización de evidencias relacionadas con el temario que se haya cubierto. Se tratará de ejercicios más elaborados que los que se hayan resuelto en clase y que podrán requerir el uso de conocimientos de distintos temas ya estudiados en el temario. La nota final de Evidencias

será una media ponderada de las notas.

Evaluación Única

La asistencia a las sesiones de prácticas y la presentación de los informes es obligatoria para todos los alumnos independientemente de la modalidad de evaluación a la que se acojan. Además, el alumnado que se haya acogido en la modalidad de evaluación única deberá realizar una prueba final que consistirá en un examen de todo el temario teórico, de problemas y de las evidencias de la asignatura. Esta prueba se realizará el día en que los estudiantes de evaluación continua realizan el examen del segundo parcial. La calificación del estudiante será:

$$\text{Nota de la asignatura} = (\text{Examen} \cdot 8.5 + \text{Prácticas} \cdot 1.5)/100$$

Si la nota del examen no llega a 4.5 o bien, la nota global no llega a 5, el estudiante tiene otra oportunidad de superar la asignatura mediante un examen de recuperación. Éste se celebrará en la fecha que fije la coordinación de la titulación. En esta prueba se podrá recuperar el 85% de la nota correspondiente a la parte de la teoría y problemas. Las demás actividades evaluativas no son recuperables.

Fraude en el proceso de evaluación

La realización de cualquier irregularidad en un acto de evaluación (fraude académico, plagio o uso indebido de la IA, salvo que este uso esté autorizado expresamente en la guía docente), que pueda conducir a una variación significativa de la calificación, supone que este acto se calificará con un 0. En caso de que la guía docente prevea que para superar la asignatura sea requisito diversas irregularidades en los actos de evaluación de una misma asignatura, la calificación final de esta asignatura es 0. Al margen de esto, se podrá instruir un proceso disciplinario al estudiante que incurra en alguna de estas irregularidades.

Bibliografía

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

"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.

"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 por los cálculos y Gaussview 6 por la construcción y visualización de moléculas.

Grupos e idiomas de la asignatura

La información proporcionada es provisional hasta el 30 de noviembre. A partir de esta fecha, podrá consultar el idioma de cada grupo a través de este [enlace](#). Para acceder a la información, será necesario introducir el CÓDIGO de la asignatura

Tipo de docencia	Grupo	Idioma	Semestre	Turno
(TE) Teoría	1	Catalán	primer cuatrimestre	tarde
(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
(PLAB) Prácticas de laboratorio	3	Catalán	primer cuatrimestre	mañana-mixto