

Química Computacional de Sòlids**2013/2014**

Codi: 102508

Crèdits: 6

Titulació	Tipus	Curs	Semestre
2502444 Química	OT	4	0

Professor de contacte

Nom: Xavier Solans Monfort

Correu electrònic: Xavier.Solans@uab.cat

Utilització d'idiomes

Llengua vehicular majoritària: català (cat)

Algun grup íntegre en anglès: No

Algun grup íntegre en català: Sí

Algun grup íntegre en espanyol: No

Prerequisits

És important haver cursat l'assignatura de química quàntica així com la ciència de materials.

Objectius

L'assignatura Química Computacional de Sòlids està dissenyada per introduir a l'alumne les estratègies computacionals per modelitzar i simular les propietats electròniques i espectroscòpiques de materials senzills i les seves superfícies. També, es presenten les estratègies per modelitzar els fenòmens d'adsorció i la reactivitat en sistemes heterogenis sòlid-gas.

Per aquest motiu, la primera part de l'assignatura es centra en presentar els diferents mètodes de càlcul (mètodes basats amb la funció d'ona, basats amb la teoria del funcional de la densitat (DFT) i mètodes de mecànica clàssica). En una segona part es presenten les particularitats de la modelització de sistemes periòdics, fent èmfasi especial a la modelització de superfícies i els fenòmens d'adsorció.

Els objectius generals són:

1. Discernir entre els diferents mètodes de la química quàntica i mecànica molecular.
2. Distingir els models més habituals de la modelització de sòlids així com conèixer els seus avantatges i limitacions
3. Descriure els principals processos per modelitzar superfícies i processos d'adsorció.
4. Aplicar els models més comuns de la simulació de materials a casos senzills.

Competències

- Química
- Adaptar-se a noves situacions.
- Aplicar els coneixements químics a la resolució de problemes de naturalesa quantitativa o qualitativa en àmbits familiars i professionals.
- Aprendre de manera autònoma.
- Comunicar-se oralment i per escrit en la llengua pròpia.
- Demostrar iniciativa i esperit emprenedor.
- Demostrar motivació per la qualitat.

- Demostrar que es comprenen els conceptes, els principis, les teories i els fets fonamentals de les diferents àrees de la química.
- Emprar correctament la llengua anglesa en l'àmbit de la química.
- Gestionar l'organització i la planificació de tasques.
- Gestionar, analitzar i sintetitzar informació.
- Interpretar les dades obtingudes mitjançant mesures experimentals, incloent-hi l'ús d'eines informàtiques; identificar-ne el significat i relacionar les dades amb les teories químiques, físiques o biològiques apropiades.
- Mantenir un compromís ètic.
- Mostrar sensibilitat en qüestions mediambientals.
- Obtenir informació, incloent-hi la utilització de mitjans telemàtics.
- Proposar idees i solucions creatives.
- Raonar de forma crítica.
- Reconèixer i analitzar problemes químics i plantejar respostes o treballs adequats per a resoldre'ls.
- Resoldre problemes i prendre decisions.
- Tenir destresa per al càlcul numèric.
- Treballar en equip i cuidar les relacions interpersonals de treball.
- Utilitzar la informàtica per al tractament i presentació d'informació.

Resultats d'aprenentatge

1. Adaptar-se a noves situacions.
2. Analitzar els resultats obtinguts en els càlculs de modelització de materials sòlids.
3. Aplicar models finits en problemes de química de superfícies simples.
4. Aprendre de manera autònoma.
5. Comparar els fonaments dels mètodes de la química quàntica i de la mecànica molecular.
6. Comunicar-se oralment i per escrit en la llengua pròpia.
7. Construir un model finit representatiu a partir de l'estructura cristal·lina del sòlid.
8. Construir un modelo de superfície simple a partir de la estructura cristal·lina del sòlid.
9. Demostrar iniciativa i esperit emprenedor.
10. Demostrar motivació per la qualitat.
11. Descriure les bases de la simulació per ordinador.
12. Diferenciar entre les diverses estratègies que s'apliquen en la simulació de materials.
13. Distingir els models de superfície utilitzats per modelitzar el comportament de sòlids.
14. Gestionar l'organització i la planificació de tasques.
15. Gestionar, analitzar i sintetitzar informació.
16. Identificar els fonaments bàsics de la modelització de sòlids.
17. Llegir, analitzar i extreure informació de textos en llengua anglesa sobre els diversos àmbits del camp de la química de materials.
18. Manejar programes informàtics de càlcul, de simulació i de tractament de bases de dades per analitzar mesures estructurals de materials.
19. Mantenir un compromís ètic.
20. Mostrar sensibilitat en qüestions mediambientals.
21. Obtenir informació, incloent-hi la utilització de mitjans telemàtics.
22. Plantejar la modelització de processos d'adsorció de molècules simples en superfícies conegudes.
23. Plantejar simulacions per a l'obtenció d'informació energètica i d'estructura electrònica de sòlids cristal·lins ben descrits.
24. Proposar idees i solucions creatives.
25. Raonar de forma crítica.
26. Reconèixer els termes bàsics associats a la modelització de sòlids en llengua anglesa.
27. Reconèixer l'estratègia de modelització de sòlids aplicada a exemples procedents de fonts bibliogràfiques.
28. Resoldre problemes i prendre decisions.
29. Tenir destresa per al càlcul numèric.
30. Treballar en equip i cuidar les relacions interpersonals de treball.
31. Utilitzar la informàtica per al tractament i presentació d'informació.

Continguts

L'assignatura es divideix essencialment en dues parts. Una primera part general on s'introdueixen els mètodes de càlculs més comuns i una segona part en la que es detallen les particularitats de la modelització de materials i superfícies.

En concret els temes principals de l'assignatura són.

Primera part: Fonaments de la química computacional.

1. Introducció a la química computacional.
2. Mètodes de la mecànica quàntica basats en el mètode Hartree-Fock.
3. Mètodes basats en la teoria del funcional de la densitat (DFT)
4. Mecànica molecular.
5. Mètodes híbrids.
6. Exploració de la superfícies de potencial i solvatació.

Segona part: Aplicació en la simulació de sòlids i superfícies.

7. Introducció a la modelització de sòlids.
8. Models periòdics
9. Modelització de superfícies.
10. Modelització de processos d'adsorció.
11. Models finits.

Metodologia

El curs es desenvolupa principalment a través de dues activitats dirigides:

1. Les classes magistrals on el professor presenta i explica el contingut teòric del curs i on es discuteixen exemples i problemes senzills.
2. Les sessions de pràctiques en l'aula d'informàtica. En aquestes sessions els alumnes apliquen a casos senzills els nivells de càlcul presentats durant al curs així com els models més habituals de la modelització de sòlids i superfícies. A mesura que avancen les sessions pràctiques aquestes seran més obertes afavorint la iniciativa de l'estudiant per resoldre el problema plantejat.

Activitats formatives

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Tipus: Dirigides			
Classes magistrals	36	1,44	3, 5, 6, 11, 12, 13, 16, 19, 25, 26, 27
Sessions pràctiques	18	0,72	1, 2, 4, 7, 8, 9, 14, 15, 18, 21, 22, 23, 24, 25, 27, 28, 30, 31
Tipus: Supervisades			

Preparació de les pràctiques	5	0,2	14
Tipus: Autònomes			
Accés a fonts bibliogràfiques de caràcter científic	12	0,48	2, 4, 6, 9, 13, 14, 15, 17, 21, 24, 26, 27, 28, 30
Estudi	42	1,68	4, 5, 11, 12, 14, 16, 25, 26, 27

Avaluació

L'avaluació de l'assignatura es realitzarà en base a tres notes:

1. Examen parcial que equivaldrà al 55% de la nota final (30% el primer parcial i 25% el segon). Caldrà obtenir un mínim de 4 sobre 10 de cada un d'ells per fer mitjana amb la resta de qualificacions. Els alumnes que ho requereixin podran recuperar un o tots dos parciais en un examen final a l'acabament del semestre.

2. Exposició oral d'un article científic (15% de la nota final): Es realitzarà una exposició oral curta d'un article científic. Caldrà presentar la metodologia emprada per la font bibliogràfica, discutir la seva idoneïtat i els resultats obtinguts.

3. Informes de les practiques realitzades a l'aula d'informàtica (30% de la nota final): Les pràctiques seran evaluades mitjançant un informe breu que inclourà els resultats obtinguts i un anàlisi del mètode i model emprat.

Es considerarà que l'alumne no s'ha presentat a l'assignatura si fins i tot obtenint la màxima qualificació de les proves en les que l'alumne s'ha presentat, aquest no pot assolir el mínim per superar el curs.

Activitats d'avaluació

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Examen parcial	60%	6	0,24	2, 3, 5, 11, 12, 13, 16, 25, 26, 27, 28, 29
Exposició oral de fonts bibliogràfiques	10%	3	0,12	1, 4, 10, 11, 15, 17, 21, 22, 23, 25, 26, 30
Informes de pràctiques	30%	28	1,12	2, 3, 4, 7, 8, 10, 13, 14, 15, 20, 21, 22, 23, 28, 29, 30, 31

Bibliografia

En tractar-se d'una assignatura altament especialitzada no hi ha una única font bibliogràfica que cobreixi tot el curs. El llibre que inclou més part del curs és:

- C. J. Cramer "Essentials of Computational Chemistry: Theories and models" John Wiley and Sons.