

**Guia docent de l'assignatura "Química Quàntica"****2011/2012**

Codi: 102503

Crèdits ECTS: 6

Titulació	Pla	Tipus	Curs	Semestre
2502444 Química	953 Graduat en Química	OB	2	1

**Contacte**

Nom : Mariona Sodupe Roure

Email : Mariona.Sodupe@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**

Cal haver aprovat l'assignatura de Fonaments de Química de primer. És recomenable haver aprovat també les assignatures de matemàtiques i Física de primer.

**Objectius i contextualització**

Adquisició de coneixements bàsics de Química Quàntica. Donat que alguns dels conceptes impliquen una certa complexitat matemàtica és també un objectiu del curs que l'alumne aprengui a usar diverses eines matemàtiques i informàtiques amb certa desimboltura per tal de resoldre qüestions d'àlgebra i càlcul com és la resolució d'equacions diferencials, diagonalització i altres operacions amb matrius i integrals impròpies. D'altra banda, donat que la Química Quàntica tracta amb sistemes "invisibles" (àtoms, electrons) pels quals la física que s'aplica és poc intuïtiva, un altre objectiu del curs serà que els alumnes aprenguin a raonar amb conceptes quàntics i a deduir-ne les seves implicacions a nivell macroscòpic. També és un objectiu que l'alumne es familiaritzi en l'us de programes de química computacional.

**Competències i resultats d'aprenentatge****1955:E01 - Demostrar que es comprenen els conceptes, els principis, les teories i els fets fonamentals de les diferents àrees de la química.**

1955:E01.30 - Descriure els principis de la mecànica quàntica i reconèixer-ne l'aplicació en la descripció de l'estructura i les propietats d'àtoms i molècules.

**1955:E03 - Reconèixer i analitzar problemes químics i plantejar respostes o treballs adequats per a resoldre'ls.**

1955:E03.07 - Identificar i analitzar problemes relacionats amb l'estructura de les molècules.

**1955:E09 - Emprar correctament la llengua anglesa en l'àmbit de la química.**

1955:E09.05 - Resumir un text científic relacionat amb l'assignatura, en llengua anglesa

**1955:T01 - Comunicar-se oralment i per escrit en la llengua pròpia.**

1955:T01.00 - Comunicar-se oralment i per escrit en la llengua pròpia.

**1955:T02 - Gestionar l'organització i la planificació de tasques.**

1955:T02.00 - Gestionar l'organització i la planificació de tasques.

**1955:T03 - Resoldre problemes i prendre decisions.**

1955:T03.00 - Resoldre problemes i prendre decisions.

**1955:T04 - Obtenir informació, incloent-hi la utilització de mitjans telemàtics.**

1955:T04.00 - Obtenir informació, incloent-hi la utilització de mitjans telemàtics.

**1955:T05 - Gestionar, analitzar i sintetitzar informació.**

1955:T05.00 - Gestionar, analitzar i sintetitzar informació.

**1955:T06 - Utilitzar la informàtica per al tractament i presentació d'informació.**

1955:T06.00 - Utilitzar la informàtica per al tractament i presentació d'informació.

**1955:T07 - Tenir destresa per al càlcul numèric.**

1955:T07.00 - Tenir destresa per al càlcul numèric.

**1955:T10 - Operar amb un cert grau d'autonomia i integrar-se en poc temps en l'ambient de treball.**

1955:T10.00 - Operar amb un cert grau d'autonomia i integrar-se en poc temps en l'ambient de treball.

**1955:T11 - Raonar de forma crítica.**

1955:T11.00 - Raonar de forma crítica.

**1955:T12 - Mantenir un compromís ètic.**

1955:T12.00 - Mantenir un compromís ètic.

**1955:T13 - Aprendre de manera autònoma.**

1955:T13.00 - Aprendre de manera autònoma.

**1955:T14 - Adaptar-se a noves situacions.**

1955:T14.00 - Adaptar-se a noves situacions.

**1955:T15 - Proposar idees i solucions creatives.**

1955:T15.00 - Proposar idees i solucions creatives.

**1955:T17 - Demostrar iniciativa i esperit emprenedor.**

1955:T17.00 - Demostrar iniciativa i esperit emprenedor.

**1955:T18 - Demostrar motivació per la qualitat.**

1955:T18.00 - Demostrar motivació per la qualitat.

## **Continguts**

### **Classes teòriques**

#### **Fonaments de la mecànica Quàntica**

Introducció històrica

Fonaments matemàtics

Postulats de la Mecànica Quàntica

Principi d'indeterminació de Heisenberg.

Partícula en una caixa

Oscil·lador harmònic

#### **Estructura atòmica**

Moment Angular

Àtom d'hidrogen

Spin. Principi d'antisimetria

Àtoms polieletrònics

## **Estructura molecular**

Aproximació Born-Oppenheimer

Molècula  $H_2^+$

Aproximació OM\_CLOA

Molècula de  $H_2$

Mètode de Hartree-Fock

Correlació electrònica

Mètodes DFT

## **Classes pràctiques**

**Sessió 1.** Iniciació a la química computacional

**Sessió 2.** Estructura electrònica. Mètode Hartree-Fock

**Sessió 3.** Superfícies d'energia potencial I. Estructura molecular. Energies de Reacció.

**Sessió 4.** Superfícies d'energia potencial II. Reactivitat Química.

**Sessió 5 i 6.** Treball personal sobre reactivitat Química.

## **Metodologia**

La metodologia docent es basa en quatre tipus d'activitats formatives: classes de teoria, classes de problemes, seminaris i sessions pràctiques.

### **Classes de teoria**

El professor/a explicarà el contingut del programa amb suport audiovisual que estarà a disposició dels estudiants al Campus Virtual.

### **Classes de problemes**

A principi de curs es lliurarà un dossier amb els enunciats dels problemes que els alumnes hauran d'anar resolent al llarg del curs. La resolució/plantejament dels exercicis es farà a les classes de problemes sota la direcció del professor.

### **Seminaris**

Per reforçar els continguts de teoria el professor lliurarà als estudiants diferents textos, exercicis, etc. que aquests hauran de comentar/resoldre en equip fora de l'aula. En aquestes sessions es discutiran i posaran en comú els coneixements adquirits.

### **Classes pràctiques**

En les sessions pràctiques els alumnes es familiaritzaran amb programes de química computacional. Les classes es realitzaran a l'aula informàtica per parelles. Els alumnes aplicaran els mètodes de la química quàntica per estudiar l'estructura i reactivitat de sistemes químics. En les dues últimes sessions, i sota la direcció del professor, aplicaran els coneixements adquirits per a resoldre un problema químic. Els resultats obtinguts d'aquest treball s'exposaran i discutiran en els seminaris.

## Activitats formatives

Activitat	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
<b>Tipus: Dirigides</b>			
Classes de problemes	10	0.4	1955:E01.30 , 1955:T03.00 , 1955:T05.00 , 1955:T11.00 , 1955:T14.00 , 1955:T17.00 , 1955:T15.00 , 1955:T13.00 , 1955:T07.00 , 1955:T04.00 , 1955:E03.07
Classes de pràctiques	16	0.64	1955:E01.30 , 1955:T04.00 , 1955:T06.00 , 1955:T14.00 , 1955:T13.00 , 1955:T12.00 , 1955:T11.00 , 1955:T10.00 , 1955:T07.00 , 1955:T05.00 , 1955:T03.00 , 1955:E03.07 , 1955:E09.05 , 1955:T02.00 , 1955:T01.00
Classes magistrals	28	1.12	1955:E01.30 , 1955:E03.07 , 1955:T05.00 , 1955:T04.00 , 1955:T13.00 , 1955:T18.00 , 1955:T14.00 , 1955:T12.00 , 1955:T11.00
<b>Tipus: Supervisades</b>			
Treball pràctic	8	0.32	1955:E01.30 , 1955:E03.07 , 1955:E09.05 , 1955:T02.00 , 1955:T04.00 , 1955:T06.00 , 1955:T11.00 , 1955:T15.00 , 1955:T18.00 , 1955:T17.00 , 1955:T12.00 , 1955:T07.00 , 1955:T05.00 , 1955:T03.00 , 1955:T01.00
<b>Tipus: Autònomes</b>			
Estudi	53	2.12	1955:E01.30 , 1955:E03.07 , 1955:T02.00 , 1955:T04.00 , 1955:T03.00

## Avaluació

**Examens escrits:** Es programaran tres examens al llarg del curs. Un primer parcial cap a mitjans del curs, un segon parcial al final de les classes teòriques i un tercer examen de "repeca" unes dues setmanes després d'haver acabat el curs. Si s'han aprovat els dos parcials no caldrà presentar-se a l'examen final. L'alumne es podrà presentar a l'examen final per millorar nota, per recuperar un parcial o per recuperar-ne els dos. Caldrà obtenir un mínim de 4 punts (sobre 10) en aquesta part per poder aprovar l'assignatura.

**Informes de pràctiques:** Es presentaran després de cada pràctica. Els guions estan pre-escrits i només caldrà respondre a les preguntes formulades en els guions. La presentació d'aquests informes és obligatòria.

**Presentació oral dels resultats de la pràctica final:** La darrera pràctica, que dura dues sessions, es planteja com un problema obert que serà diferent per a cada grup de pràctiques. En aquest cas els mateixos alumnes hauran de fer-se el guió i presentar els resultats en un informe escrit i una exposició oral. Aquestes exposicions tindran lloc a les classes programades després de Nadal. Cada grup disposarà d'un temps de presentació i hi haurà també un torn de preguntes. La nota d'aquesta part provindrà majoritàriament de la part expositiva, tot i que també es valorarà l'informe escrit que caldrà adjuntar, i de la participació de cada alumne a les preguntes. La presentació escrita i oral d'aquest exercici és obligatòria.

**Evidències:** Al llarg del curs es faran dues proves "sorpresa" de curta durada on es plantejarà un problema o qüestió teòrica a resoldre.

## Activitats d'avaluació

Activitat	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Evidències	5%	2	0.08	1955:E01.30 , 1955:E03.07 , 1955:T03.00 , 1955:T05.00 ,

				1955:T18.00 , 1955:T12.00 , 1955:T11.00 , 1955:T07.00
Examens escrits (parcial i final)	60%	8	0.32	1955:E01.30 , 1955:E03.07 , 1955:T03.00 , 1955:T01.00 , 1955:T11.00 , 1955:T07.00
Informe de pràctiques	20%	10	0.4	1955:E01.30 , 1955:E03.07 , 1955:E09.05 , 1955:T02.00 , 1955:T04.00 , 1955:T06.00 , 1955:T10.00 , 1955:T13.00 , 1955:T14.00 , 1955:T11.00 , 1955:T07.00 , 1955:T05.00 , 1955:T03.00 , 1955:T01.00
presentació oral dels resultats del problema final de pràctiques	15%	15	0.6	1955:E01.30 , 1955:T06.00 , 1955:T18.00 , 1955:T17.00 , 1955:T15.00 , 1955:T14.00 , 1955:T13.00 , 1955:T11.00 , 1955:T10.00 , 1955:T07.00 , 1955:T05.00 , 1955:E09.05 , 1955:T02.00 , 1955:T03.00 , 1955:T04.00 , 1955:T01.00 , 1955:E03.07

## Bibliografia

### BIBLIOGRAFIA BàSICA

"*Química Cuántica*" J. Bertran, V. Branchadell, M. Moreno, M. Sodupe, Ed. Síntesis. ISBN:84-7738-742-7 (versió electrònica a [www.sintesis.com](http://www.sintesis.com))

### BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTÀRIA

"Química Cuántica" I.N. Levine, Ed. prentice Hall. ISBN: 84-205-3096-4

"Absolutely Small" M. D. Fayer, Ed. McGraw-Hill. ISBN: 978-0814414880

"Elementary Quantum Chemistry" F.L. Pilar, Ed. McGraw-Hill. ISBN: 0-07-100857-8

"Molecular Quantum Mechanics" P.W. Atkins, Ed. Oxford, ISBN: 0-19-855170-3