

Química Quàntica

2012/2013

Codi: 102503

Crèdits ECTS: 6

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

Professor de contacte

Nom: Mariona Sodupe Roure

Correu electrònic: 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

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 eines matemàtiques i informàtiques amb certa desimboltura per tal de resoldre qüestions d'àlgebra i càlcul. D'altra banda, donat que la Química Quàntica tracta amb sistemes atòmics/moleculars, 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 amb l'us de programes de química computacional.

Competències

- Adaptar-se a noves situacions.
- 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.
- Mantenir un compromís ètic.
- Obtenir informació, incloent-hi la utilització de mitjans telemàtics.
- Operar amb un cert grau d'autonomia i integrar-se en poc temps en l'ambient de treball.
- 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.
- Utilitzar la informàtica per al tractament i presentació d'informació.

Resultats d'aprenentatge

1. Adaptar-se a noves situacions.
2. Aprendre de manera autònoma.
3. Comunicar-se oralment i per escrit en la llengua pròpia.
4. Demostrar iniciativa i esperit emprenedor.
5. Demostrar motivació per la qualitat.
6. 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.
7. Gestionar l'organització i la planificació de tasques.
8. Gestionar, analitzar i sintetitzar informació.
9. Identificar i analitzar problemes relacionats amb l'estructura de les molècules.
10. Mantenir un compromís ètic.
11. Obtenir informació, incloent-hi la utilització de mitjans telemàtics.
12. Operar amb un cert grau d'autonomia i integrar-se en poc temps en l'ambient de treball.
13. Proposar idees i solucions creatives.
14. Raonar de forma crítica.
15. Resoldre problemes i prendre decisions.
16. Resumir un text científic relacionat amb l'assignatura, en llengua anglesa
17. Tenir destresa per al càlcul numèric.
18. Utilitzar la informàtica per al tractament i presentació d'informació.

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. Estructura electrònica. Mètode Hartree-Fock

Sessió 2. Superfícies d'energia potencial I. Estructura molecular. Energies de Reacció.

Sessió 3. Superfícies d'energia potencial II. Reactivitat Química.

Sessió 4 i 5. 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

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Tipus: Dirigides			
Classes de problemes	10	0,4	1, 2, 4, 8, 11, 13, 14, 15, 17
Classes de pràctiques	16	0,64	1, 2, 3, 7, 8, 10, 11, 12, 14, 15, 16, 17, 18
Classes magistrals	28	1,12	1, 2, 5, 8, 10, 11, 14

Tipus: Supervisades			
Treball pràctic	8	0,32	3, 4, 5, 7, 8, 10, 11, 13, 14, 15, 16, 17, 18
Tipus: Autònomes			
Estudi	53	2,12	7, 11, 15

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 "repesca" 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 els alumnes hauran d'entregar un parell d'exercicis complementaris sobre el que s'ha anat treballant a classe.

Activitats d'avaluació

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Evidències	5%	2	0,08	5, 6, 8, 9, 10, 14, 15, 17
Examens escrits (parcial i final)	60%	8	0,32	3, 14, 15, 17
Informe de pràctiques	20%	10	0,4	1, 2, 3, 7, 8, 11, 12, 14, 15, 16, 17, 18
Presentació oral dels resultats del problema final de pràctiques	15%	15	0,6	1, 2, 3, 4, 5, 7, 8, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18

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)

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