

**Fenòmens Quàntics I****2013/2014**

Codi: 103287

Crèdits: 6

Titulació	Tipus	Curs	Semestre
2501922 Nanociència i Nanotecnologia	OB	3	1

**Professor de contacte**

Nom: Agustí Lledós Falcó

Correu electrònic: Agustí.Lledós@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**

Es recomanable haver aprovat les assignatures "Enllaç Químic i Estructura de la Matèria", "Mecànica i Ones" i "Física Clàssica".

**Objectius**

Adquisició de coneixements bàsics de Mecànica Quàntica i de la seva aplicació per analitzar les propietats de la matèria a l'escala nanomètrica. El curs està organitzat en tres unitats. A la primera s'introdueixen els fonaments de la descripció quàntica de la matèria. Una segona unitat desenvolupa aquests fonaments per a convertir-los en una potent maquinària per al càlcul. En la tercera part es mostren les seves aplicacions en la simulació de sistemes nanoscòpics.

**Competències**

- Nanociència i Nanotecnologia
- Aplicar els conceptes, principis, teories i fets fonamentals relacionats amb la nanociència i la nanotecnologia a la resolució de problemes de natura quantitativa o qualitativa en l'àmbit de la nanociència i la nanotecnologia.
- Aprendre de manera autònoma.
- Comunicar-se oralment i per escrit en la llengua pròpia.
- Demostrar que es comprenen els conceptes, principis, teories i fets fonamentals relacionats amb la nanociència i la nanotecnologia.
- Gestionar l'organització i la planificació de tasques.
- Interpretar les dades obtingudes mitjançant mesures experimentals, incloent-hi l'ús d'eines informàtiques, identificar-ne el significat i relacionar-les amb les teories químiques, físiques o biològiques apropiades.
- Obtenir, gestionar, analitzar, sintetitzar i presentar informació, incluent-hi la utilització de mitjans telemàtics i informàtics.
- Proposar idees i solucions creatives.
- Raonar de forma crítica.
- Reconèixer els termes relatius als àmbits de la física, la química, la biologia, la nanociència i la nanotecnologia en llengua anglesa i fer servir l'anglès de manera eficaç per escrit i oralment en l'àmbit laboral.
- Reconèixer i analitzar problemes físics, químics i biològics en l'àmbit de la nanociència i la nanotecnologia i plantejar respostes o treballs adequats per a la seva resolució, incloent-hi en els casos

- necessaris l'ús de fonts bibliogràfiques.
- Resoldre problemes i prendre decisions.

## Resultats d'aprenentatge

1. Analitzar situacions i problemes en l'àmbit de la física i plantejar respostes o treballs de tipus experimental utilitzant fonts bibliogràfiques.
2. Aplicar els continguts teòrics adquirits a l'explicació de fenòmens experimentals.
3. Aplicar l'equació de Schroedinger a sistemes quàntics unidimensionals com pous de potencial i/o oscil·ladors i a tridimensionals com molècules.
4. Aprendre de manera autònoma.
5. Avaluar els resultats experimentals de manera crítica i deduir-ne el significat.
6. Comunicar-se oralment i per escrit en la llengua pròpia.
7. Emprar la tecnologia de la informació i la comunicació per a la documentació de casos i problemes.
8. Exposar informes breus sobre la matèria en anglès.
9. Fer cerques bibliogràfiques de documentació científica.
10. Gestionar l'organització i la planificació de tasques.
11. Indicar les bases físiques de la mecànica quàntica i relacionar-les amb fets experimentals.
12. Interpretar textos i bibliografia en anglès sobre física i materials a nivell bàsic.
13. Obtenir, gestionar, analitzar, sintetitzar i presentar informació, incluent-hi la utilització de mitjans telemàtics i informàtics.
14. Proposar idees i solucions creatives.
15. Raonar de forma crítica.
16. Reconèixer els termes relatius a la física i els materials.
17. Reconèixer en processos fisicoquímics els fenòmens d'intercanvis d'energia i les lleis que els governen.
18. Reconèixer la dualitat ona-partícula.
19. Redactar informes sobre la matèria en anglès.
20. Relacionar les propietats dels àtoms i molècules amb la mecànica quàntica.
21. Resoldre l'equació de Schrödinger per a problemes unidimensionals i ser capaç de calcular l'efecte túnel en diversos sistemes físics.
22. Resoldre problemes amb l'ajuda de bibliografia complementària proporcionada.
23. Resoldre problemes i prendre decisions.
24. Utilitzar correctament les eines informàtiques necessàries per a calcular, representar gràficament i interpretar les dades obtingudes, així com la seva qualitat.
25. Utilitzar programes de tractament de dades per elaborar informes.

## Continguts

### I. Fonaments

Orígens de la Mecànica Quàntica. - Radiació del cos negre. Hipòtesi de Planck.- Model de Bohr.- Dualitat ona partícula.- Principi d'incertesa de Heisenberg.- Natura quàntica de la matèria.

### Elements de matemàtiques

Postulats de la mecànica Quàntica.- Equació de Schrödinger.- Aplicació a sistemes senzills.- Àtom d'hidrogen.- Moment angular.- Orbitals atòmics.- Spin

### II. Maquinària

Aproximacions per a la descripció de sistemes polieletrònics i polinuclears.

Àtoms polieletrònics.- Antisimetria: Principi de Pauli.- Determinant de Slater.

Estructura electrònica molecular.- Aproximació de Born-Oppenheimer.- Aproximació d'orbitals moleculars.

El mètode Hartree-Fock.- Mes enllà del mètode Hartree-Fock. Correlació electrònica.

Teoria del funcional de la densitat.

### III. Aplicacions

Aplicacions de la Mecànica Quàntica.- Jerarquia de mètodes teòrics.

Simulacions com experiments computacionals.- Teories i models.- Nivells de càlcul.

Estructures i reaccions: Superfícies d'energia potencial.- Optimitzacions de geometria.- Càlcul de propietats moleculars.

Sistemes complexos.

Classes pràctiques

Sessió 1. Estructura electrònica. Mètode Hartree-Fock. Correlació electrònica. Mètodes DFT.

Sessió 2. Optimització de geometria. Determinació de propietats moleculars.

Sessió 3. Superfícies d'energia potencial. Energies d'enllaç, assemblatge i reacció.

Sessió 4. Superfícies d'energia potencial. Simulació de reaccions químiques.

## Metodologia

### Classes de teoria

El professor/a explicarà el contingut del programa amb suport audiovisual. Es disposarà de material de suport per als alumnes al Campus Virtual.

### Classes de problemes

Les classes de problemes serviran per consolidar i veure'n com es porten a la pràctica els coneixements adquirits en les classes de teoria. S'aniran intercalant amb les classes de teoria per reforçar-ne aspectes determinats o en acabar les unitats temàtiques. Els alumnes disposaran dels enunciats dels exercicis que hauran d'anar resolent al llarg del curs. El plantejament/resolució dels exercicis es farà a les classes de problemes sota la direcció del professor.

### Sessions de pràctiques

Les sessions pràctiques es duran a terme a l'aula informàtica. Els alumnes utilitzaran programes de càlcul que apliquen la metodologia de la mecànica quàntica per a estudiar l'estructura i evolució de sistemes nanoscòpics.

## Activitats formatives

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Tipus: Dirigides			
Classes de problemes	10	0,4	1, 3, 11, 17, 18, 20, 21, 22, 23
Classes de teoria	28	1,12	3, 11, 17, 18, 20, 21
Sessions de pràctiques	12	0,48	2, 4, 5, 7, 15, 23, 24, 25
Tipus: Supervisades			
Presentació oral	4	0,16	1, 2, 5, 7, 8, 9, 10, 12, 13, 15, 16, 19, 22

Tipus: Autònomes			
Estudi	68	2,72	3, 4, 11, 14, 15, 17, 18, 20, 21, 22

## Avaluació

Exàmens escrits: Suposaran el 70% de la nota. Es programaran dos exàmens parcials al llarg del curs i un examen final. Els dos exàmens parcials tenen el mateix pes (35%). Cal tenir una nota igual o superior a 4 (sobre 10) a cada parcial per poder aprovar l'assignatura sense anar a l'examen final. En cas de no haver arribat a una nota de 4 a un o els dos parcials caldrà fer l'examen final. L'examen final és només per a recuperació i comprèn tota la matèria del curs. Caldrà obtenir un mínim de 4 punts (sobre 10) en aquesta part per poder aprovar l'assignatura.

Pràctiques: Suposaran el 15% de la nota. Els alumnes hauran de contestar les preguntes formulades en els guions de les pràctiques. L'assistència a les sessions de pràctiques i la presentació dels informes es obligatori.

Presentació oral d'un treball: Suposarà el 15% de la nota. Cap al final del curs els alumnes realitzaran per grups un treball consistent en cercar, a les revistes de més impacte del camp de les Nanociències, un article recent en el que els càlculs quàntics siguin una part important dels resultats i exposar-ho públicament. Cada grup disposarà d'un temps de presentació i hi haurà també un torn de preguntes. La presentació oral es obligatòria.

## Activitats d'avaluació

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Exàmens escrits (parcials i final)	70%	8	0,32	2, 3, 5, 6, 11, 15, 17, 18, 20, 21, 22, 23
Informes de pràctiques	15%	10	0,4	2, 3, 4, 5, 6, 7, 9, 10, 11, 13, 17, 18, 20, 21, 22, 23, 24, 25
Presentació oral d'un treball	15%	10	0,4	1, 2, 3, 4, 5, 7, 8, 9, 11, 12, 13, 14, 15, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23

## Bibliografia

"Quantum Chemistry" sixth edition, Ira N. Levine, Prentice Hall, 2009. ISBN: 978-0136131069. Existeix una versió espanyola de la cinquena edició.

"Molecular Quantum Mechanics" fourth edition, Peter Atkins, Ronald Friedman, Oxford University Press, 2005. 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.

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

"Absolutely Small", Michael D. Fayer, McGraw-Hill 2010. ISBN: 978-0814414880.

Jeffrey C Grossman; Elif Ertekin (2008), "Overview of Computational Nanoscience: a UC Berkeley Course," <http://nanohub.org/resources/3944>.

