

Fenòmens Quàntics I**2015/2016**

Codi: 103287

Crèdits: 6

| Titulació | Tipus | Curs | Semestre |
|--------------------------------------|-------|------|----------|
| 2501922 Nanociència i Nanotecnologia | OB | 3 | 1 |

Professor de contacte

Nom: Agustí Lledós Falcó

Correu electrònic: Agusti.Lledos@uab.cat

Utilització de llengües

Llengua vehicular majoritària: català (cat)

Altres indicacions sobre les llengües

Les transparències del curs son en anglès

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

- 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, 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. Podran optar a la qualificació "Matrícula d'Honor" els alumnes que hagin obtingut una nota igual o superior a 8 als dos examens parcials.

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>.