

**Química Computacional de Sòlids**

Codi: 102508

Crèdits: 6

Titulació	Tipus	Curs	Semestre
2502444 Química	OT	4	2

### Professor/a de contacte

Nom: Xavier Solans Monfort

Correu electrònic: Xavier.Solans@uab.cat

### Utilització d'idiomes a l'assignatura

Llengua vehicular majoritària: català (cat)

Grup íntegre en anglès: No

Grup íntegre en català: Sí

Grup íntegre en espanyol: No

### Prerequisits

És important haver cursat l'assignatura de química quàntica així com les assignatures ciència dels materials i caracterització 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 molecular). 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. Determinar els mètodes de càlcul més adients per resoldre una problemàtica determinada.
2. Contrastar els avantatges i inconvenients dels models més habituals per la modelització de sòlids en problemàtiques senzilles
3. Dissenyar estratègies per modelitzar superfícies i processos d'adsorció.
4. Aplicar els models més comuns de la simulació de materials a casos senzills.

### Competències

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

## Metodologia

El curs es desenvolupa principalment a través de tres 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. Sessions a l'aula d'informàtica on es resolen problemes senzills associats al contingut del tema que s'està treballant
3. Sessions de pràctiques.

En aquestes sessions els alumnes desenvolupen un projecte senzill d'adsorció d'una molècula senzilla a un material tipus. Aquest projecte inclou:

- a. Estudi de l'estructura electrònica del material
- b. Construcció del model de superfície i avaluació de la seva estabilitat
- c. Càlcul de l'energia d'adsorció en funció de la densitat de molècules adsorbides

Així doncs, l'alumne aplica a casos senzills els nivells de càlcul presentats durant al curs així com els models més habituals de la modelització de sòlids i superfícies. Aquestes sessions pràctiques, per contraposició a les sessions a l'aula d'informàtica, seran poc guiades afavorint la iniciativa de l'estudiant per resoldre el problema plantejat.

## Activitats formatives

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
<b>Tipus: Dirigides</b>			
Classes magistrals	34	1,36	4, 6, 7, 12, 13, 14, 17, 20, 26, 27, 28
Sessions pràctiques	18	0,72	1, 3, 5, 8, 9, 10, 15, 16, 19, 22, 23, 24, 25, 26, 28, 29, 31, 32
<b>Tipus: Supervisades</b>			
Preparació de les pràctiques	5	0,2	15
<b>Tipus: Autònomes</b>			
Accés a fonts bibliogràfiques de caràcter científic	6	0,24	3, 5, 7, 10, 14, 15, 16, 18, 22, 25, 27, 28, 29, 31
Estudi	52	2,08	5, 6, 12, 13, 15, 17, 26, 27, 28
Preparació d'exposicions orals	5	0,2	10, 11, 16, 22, 25, 29, 31, 32
Redacció d'informes i treballs	15	0,6	3, 15, 16, 19, 26, 29, 31

## Avaluació

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

1. Examen (2parcials o bé el final que els substitueix) que equivaldran al 60% de la nota final. Durant el curs es realitzaran dos examens parcials. Cada un d'ells equivaldrà al 30% de la nota final. Caldrà obtenir un mínim de 4.5 sobre 10 de cada un d'ells per fer mitjana amb la resta de qualificacions. Els alumnes que no assoleixin el 4.5 en cada parcial s'hauran de presentar a un examen final que substituirà els parcials. A més a més, per a poder-se presentar a l'examen de recuperació cal que l'alumne hagi participat en activitats d'avaluació continuada que equivalguin com a mínim a 2/3 de la nota final de l'assignatura. A l'examen final caldrà treure un 4.5 per fer mitjana amb la resta de notes..

2. Anàlisi d'articles científics (10% de la nota final): Durant el curs i a l'hora de classe es discutiran alguns articles científics recents que tractin aspectes puntuals del curs. Al final de la classe o bé el dia següent, s'entregarà un resum que serà avaluat. Aquesta nota no te requeriments mínims

3. Informes de les sessions a l'aula d'informàtica (15% de la nota final): Es realitzaran 5 sessions a l'aula informàtica per repassar i aplicar els conceptes que s'estiguin desenvolupant a la classe de teoria. Aquestes sessions s'avaluaran mitjançant un informe breu que presentarà els resultats obtinguts, la contextualització amb el contingut de l'assignatura i una discussió. L'absència injustificada a aquestes sessions comportarà suspendre l'assignatura

4. Exposició oral del treball de pràctiques realitzat en grup (15% de la nota final). Al final de les sessions de pràctiques es realitzarà una exposició oral en grup en la que es presentaran els resultats obtinguts i un anàliscrític que hauria d'incloure punts forts i febles de les simulacions realitzades en l'estudi i possibles propostes de millora. En aquest moment també s'entregarà la presentació de les pràctiques que complementarà la nota de pràctiques. L'absència no justificada a les sessions de pràctiques comportarà suspendre l'assignatura.

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
Anàlisi de fonts bibliogràfiques	10%	4	0,16	1, 2, 5, 11, 12, 16, 18, 22, 23, 24, 26, 27, 31
Examens parcials	60%	4	0,16	3, 4, 6, 12, 13, 14, 17, 26, 27, 28, 29, 30
Informes de les sessions a l'aula d'informàtica	15%	3	0,12	3, 4, 5, 8, 9, 11, 14, 15, 16, 21, 22, 23, 24, 29, 30, 31, 32
Pràctiques	15%	4	0,16	3, 4, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 17, 19, 20, 23, 24, 25, 26, 29, 30, 31, 32

## 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.