

Química Quàntica

Codi: 102503

Crèdits: 6

Titulació	Tipus	Curs	Semestre
2502444 Química	OB	2	1

Professor/a de contacte

Nom: Miquel Moreno Ferrer

Correu electrònic: Miquel.Moreno@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

Equip docent

Ricard Gelabert Peiri

Prerequisits

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

Objectius

L'objectiu fonamental del curs és l'adquisició de coneixements bàsics de Química Quàntica. Donat que la Química Quàntica tracta amb sistemes atòmics/moleculars, pels quals la física que s'aplica és poc intuïtiva, un objectiu important del curs és que els alumnes aprenguin a raonar amb conceptes quàntics i a deduir-ne les seves implicacions a nivell macroscòpic. És també un objectiu del curs que l'alumne aprengui a usar eines matemàtiques i informàtiques per resoldre exercicis d'estructura atòmica i molecular. 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

1. 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.

2. Estructura atòmica

Moment angular. Àtom d'hidrogen. Spin. Principi d'antisimetria. Àtoms polieletrònics. Determinants de Slater.

3. Estructura molecular

Aproximació Born-Oppenheimer. Molècula H_2^+ . Aproximació OM_CLOA. Conjunts de funcions de base. Molècula de H_2 . Estudis qualitatius: molècules diatòmiques i poliatòmiques

4. Química teòrica i computacional. Determinació de l'estructura electrònica

Mètode de Hartree-Fock. Correlació electrònica. Mètodes DFT.

5. Química teòrica i computacional. Superfícies de potencial

Hipersuperfícies d'energia potencial. Punts estacionaris: mínims i punts sella. Localització de punts estacionaris. Termodinàmica i dinàmica de les reaccions químiques. Espectroscòpia.

Classes pràctiques

Sessió 1. Estructura electrònica. Mètode Hartree-Fock. Conjunts de funcions de base.

Sessió 2. Optimització de geometries. Reactivitat química I.

Sessions 3 i 4. Reactivitat Química II. Estudi d'un cas específic.

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

Al llarg del curs es lliuraran els enunciats dels problemes que els alumnes hauran d'anar resolent. La resolució/plantejament d'alguns 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 l'última sessió, i sota la direcció del professor, aplicaran els coneixements adquirits per a resoldre un problema químic. Els resultats obtinguts d'aquest treball es recolliran en un informe i 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	32	1,28	1, 2, 5, 8, 10, 11, 14
Seminaris	2	0,08	3, 8, 14, 18
Tipus: Supervisades			
Treball pràctic	8	0,32	3, 4, 5, 7, 8, 10, 11, 13, 14, 15, 16, 17, 18
Tipus: Autònomes			
Estudi	47	1,88	7, 11, 15

Avaluació

Examens escrits: Es programaran tres examens al llarg del curs, dos parcials i un final. L'alumne que aprovi totes dues proves parcials NO caldrà que es presenti a la prova final. L'alumne que suspengui el primer parcial ja no es podrà presentar al segon parcial i haurà d'anar directament a fer l'examen final de recuperació per poder aprovar l'assignatura. La prova FINAL de recuperació escrita avaluarà tota la matèria impartida durant el curs. S'hi hauran de presentar aquells alumnes que hagin obtingut menys de 5 punts sobre 10 en alguna de les 2 proves parcials. Per als alumnes en aquesta situació, la qualificació definitiva serà la d'aquesta prova final i caldrà treure un mínim de 4 punts sobre 10 per a poder promitjar amb les notes de les pràctiques i les evidències. També s'hi podran presentar aquells alumnes que vulguin pujar la nota, tenint en compte que si s'hi entreguen, la qualificació definitiva serà la d'aquesta prova final. Per participar a la recuperació cal, com a mínim, que l'alumne s'hagi presentat a un parcial, hagi realitzat les pràctiques i entregat al menys una evidència.

Pràctiques: L'assistència a les pràctiques i la presentació dels informes és obligatòria. La darrera pràctica es planteja com un projecte obert diferent per a cada grup. Els resultats obtinguts en aquesta pràctica es presentaran i discutiran en un informe escrit de format lliure i en una exposició oral.

Evidències: Al llarg del curs els alumnes hauran d'entregar un mínim de dos 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
Pràctiques	35%	25	1	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