

Química Computacional de Sólidos

Código: 102508
Créditos ECTS: 6

Titulación	Tipo	Curso	Semestre
2502444 Química	OT	4	0

Contacto

Nombre: Xavier Solans Monfort

Correo electrónico: Xavier.Solans@uab.cat

Uso de idiomas

Lengua vehicular mayoritaria: catalán (cat)

Algún grupo íntegramente en inglés: No

Algún grupo íntegramente en catalán: Sí

Algún grupo íntegramente en español: No

Equipo docente

Aleix Comas Vives

Prerequisitos

Es importante haber cursado la asignatura de química cuántica, así como las asignaturas de ciencia de los materiales y caracterización de materiales.

Objetivos y contextualización

La asignatura Química Computacional de Sólidos está diseñada para introducir al alumno las estrategias computacionales para modelizar y simular la estructura electrónica de materiales sencillos y sus superficies. También, se presentan las estrategias para modelizar los fenómenos de adsorción y la reactividad en sistemas heterogéneos sólido-gas y sólido-líquido.

Por este motivo, la primera parte de la asignatura se centra en presentar los diferentes métodos de cálculo (métodos basados en la función de onda, basados en la teoría del funcional de la densidad (DFT) y métodos de mecánica molecular). En una segunda parte se presentan las particularidades de la modelización de sistemas periódicos, haciendo énfasis especial en la modelización de superficies y los fenómenos de adsorción.

Los objetivos generales son:

1. Determinar los métodos de cálculo más adecuados para resolver una problemática determinada.
2. Contrastar las ventajas e inconvenientes de los modelos más habituales para la modelización de sólidos en problemáticas sencillas.
3. Diseñar estrategias para modelizar superficies y procesos de adsorción
4. Aplicar los modelos más comunes de la simulación de materiales a casos sencillos.

Competencias

- Adaptarse a nuevas situaciones.
- Aplicar los conocimientos químicos a la resolución de problemas de naturaleza cuantitativa o cualitativa en ámbitos familiares y profesionales.
- Aprender de forma autónoma.
- Comunicarse de forma oral y escrita en la lengua nativa.
- Demostrar iniciativa y espíritu emprendedor.
- Demostrar motivación por la calidad.
- Demostrar que comprende los conceptos, principios, teorías y hechos fundamentales de las diferentes áreas de la Química.
- Gestionar la organización y planificación de tareas.
- Gestionar, analizar y sintetizar información.
- Interpretar los datos obtenidos mediante medidas experimentales, incluyendo el uso de herramientas informáticas, identificar su significado y relacionarlos con las teorías químicas, físicas o biológicas apropiadas.
- Mantener un compromiso ético.
- Mostrar sensibilidad hacia temas medioambientales.
- Obtener información, incluyendo la utilización de medios telemáticos.
- Poseer destreza para el cálculo numérico.
- Proponer ideas y soluciones creativas.
- Razonar de forma crítica.
- Reconocer y analizar problemas químicos y plantear respuestas o trabajos adecuados para su resolución, incluyendo en casos necesarios el uso de fuentes bibliográficas.
- Resolver problemas y tomar decisiones.
- Trabajar en equipo y cuidar las relaciones interpersonales de trabajo.
- Utilizar correctamente la lengua inglesa en el ámbito de la Química.
- Utilizar la informática para el tratamiento y presentación de información.

Resultados de aprendizaje

1. Adaptarse a nuevas situaciones.
2. Analizar los resultados obtenidos de las reacciones catalíticas realizadas en el laboratorio.
3. Analizar los resultados obtenidos en los cálculos de modelización de materiales sólidos.
4. Aplicar modelos finitos en problemas de química de superficies simples.
5. Aprender de forma autónoma.
6. Comparar los fundamentos de los métodos de la química cuántica y de la mecánica molecular.
7. Comunicarse de forma oral y escrita en la lengua nativa.
8. Construir un modelo de superficie simple a partir de la estructura cristalina del sólido.
9. Construir un modelo finito representativo a partir de la estructura cristalina del sólido.
10. Demostrar iniciativa y espíritu emprendedor.
11. Demostrar motivación por la calidad.
12. Describir las bases de la simulación por ordenador.
13. Diferenciar entre las distintas estrategias que se aplican en la simulación de materiales.
14. Distinguir los modelos de superficie utilizados para modelizar el comportamiento de sólidos.
15. Gestionar la organización y planificación de tareas.
16. Gestionar, analizar y sintetizar información.
17. Identificar los fundamentos básicos de la modelización de sólidos.
18. Leer, analizar y extraer información de textos en lengua inglesa sobre los diversos ámbitos del campo de la química de materiales.
19. Manejar programas informáticos de cálculo, de simulación y de tratamiento de bases de datos para analizar medidas estructurales de materiales.
20. Mantener un compromiso ético.
21. Mostrar sensibilidad hacia temas medioambientales.
22. Obtener información, incluyendo la utilización de medios telemáticos.
23. Plantear la modelización de procesos de adsorción de moléculas simples en superficies conocidas.
24. Plantear simulaciones para la obtención de información energética y de estructura electrónica de sólidos cristalinos bien descritos.

25. Poseer destreza para el cálculo numérico.
26. Proponer ideas y soluciones creativas.
27. Razonar de forma crítica.
28. Reconocer la estrategia de modelización de sólidos aplicada en ejemplos procedentes de fuentes bibliográficas.
29. Reconocer los términos básicos asociados a la modelización de sólidos en lengua inglesa.
30. Resolver problemas y tomar decisiones.
31. Trabajar en equipo y cuidar las relaciones interpersonales de trabajo.
32. Utilizar la informática para el tratamiento y presentación de información.

Contenido

La asignatura se divide esencialmente en dos partes. Una primera parte general donde se introducen los métodos de cálculo más comunes y una segunda parte en la que se detallan las particularidades de la modelización de materiales y superficies.

En concreto los temas principales de la asignatura son:

Primera parte: Fundamentos de la química computacional

1. Introducción - método Hartree-Fock
2. Métodos post-Hartree-Fock
3. Métodos basados en la teoría del funcional de la densidad (DFT)
4. Mecánica molecular y métodos híbridos.
5. Exploración de la superficie de energía potencial y solvatación.

Segunda Parte: Aplicación en la simulación de sólidos y superficies.

6. Introducción a la modelización de sólidos.
7. Modelos periódicos. Espacio real i reciproco. Teorema de Blochl.
8. Estructura de bandas y densidad de estados.
9. Modelización de superficies y procesos de adsorción. Enlace en superficies y reactividad.

Metodología

El curso implica principalmente tres tipos de actividades dirigidas.

1. Clases magistrales donde se introducen los conceptos del curso, se presentan ejemplos sencillos y se discuten casos paradigmáticos.
2. Sesiones en el aula de informática que se utilizan para abordar de forma práctica y mediante ejemplos sencillos los conceptos introducidos a lo largo del curso.
3. Sesiones de prácticas donde los alumnos aboradan un pequeño proyecto que incluye el análisis de la estructura electrónica de un semiconductor, la modelización de las superficies más relevantes y la adsorción de agua en estas superficies.

Actividades

Título	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
Tipo: Dirigidas			
Clases magistrales	34	1,36	4, 6, 7, 12, 13, 14, 17, 20, 27, 29, 28
Sesiones prácticas	18	0,72	1, 3, 5, 9, 8, 10, 15, 16, 19, 22, 23, 24, 26, 27, 28, 30, 31, 32
Tipo: Supervisadas			
Preparación de las sesiones prácticas	5	0,2	15
Tipo: Autónomas			
Bibliografía	6	0,24	3, 5, 7, 10, 14, 15, 16, 18, 22, 26, 29, 28, 30, 31
Estudio	52	2,08	5, 6, 12, 13, 15, 17, 27, 29, 28
Preparación de exposiciones orales	5	0,2	10, 11, 16, 22, 26, 30, 31, 32
Redacción de informes y resúmenes	15	0,6	3, 15, 16, 19, 27, 30, 31

Evaluación

La evaluación de la asignatura se realizará en base a cuatro notas:

1. Exámenes (2parcials o bien el final que los sustituye) que equivaldrán al 60% de la nota final. Durante el curso se realizarán dos exámenes parciales. Cada uno de ellos equivaldrá al 30% de la nota final. Será necesario obtener un mínimo de 4.5 sobre 10 de cada uno de ellos para hacer media con el resto de calificaciones. Los alumnos que no alcancen el 4.5 en cada parcial deberán presentarse a un examen final que sustituirá a los parciales. Además, para poder presentarse al examen de recuperación es necesario que el alumno haya participado en actividades de evaluación continua que equivalgan al menos a 2/3 de la nota final de la asignatura. En el examen final habrá sacar un 4.5 para hacer media con el resto de notas.
2. Análisis de artículos científicos (10% de la nota final): Durante el curso y en la hora de clase se discutirán algunos artículos científicos recientes que traten aspectos puntuales del curso. Al final de la clase o bien el día siguiente, se entregará un resumen que será evaluado. Esta nota no tiene requerimientos mínimos
3. Informes de las sesiones en el aula de informática (15% de la nota final): Se realizarán 5 sesiones en el aula informática para repasar y aplicar los conceptos que se estén desarrollando en la clase de teoría. Estas sesiones se evaluarán mediante un breve informe que presentará los resultados obtenidos, la contextualización con el contenido de la asignatura y una discusión. La ausencia injustificada a estas sesiones comportará suspender la asignatura
4. Exposición oral del trabajo de prácticas realizado en grupo (15% de la nota final). Al final de las sesiones de prácticas se realizará una exposición oral en grupo en la que se presentarán los resultados obtenidos y un análisis crítico que debería incluir puntos fuertes y débiles de las simulaciones realizadas en el estudio y posibles propuestas de mejora. La ausencia no justificada a las sesiones de prácticas comportará suspender la asignatura.

Se considerará que el alumno no se ha presentado a la asignatura si incluso obteniendo la máxima calificación de las pruebas en las que el alumno se ha presentado, este no puede alcanzar el mínimo para superar el curso.

Actividades de evaluación

Título	Peso	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
--------	------	-------	------	---------------------------

Análisis de artículos científicos	10%	4	0,16	1, 2, 5, 11, 12, 16, 18, 22, 23, 24, 27, 29, 31
Exámenes parciales	60%	4	0,16	3, 4, 6, 12, 13, 14, 17, 27, 29, 28, 30, 25
Informes de las sesiones en el aula de informática	15%	3	0,12	3, 4, 5, 9, 8, 11, 14, 15, 16, 21, 22, 23, 24, 30, 25, 31, 32
prácticas	15%	4	0,16	3, 4, 6, 7, 9, 8, 10, 11, 12, 17, 19, 20, 23, 24, 26, 27, 30, 25, 31, 32

Bibliografía

C. J. Cramer "Essentials of Computational Chemistry: Theory and Models" John Wiley and Sons