

Química Quàntica

Codi: 102503

Crèdits: 6

Titulació	Tipus	Curs	Semestre
2502444 Química	OB	2	1

La metodologia docent i l'avaluació proposades a la guia poden experimentar alguna modificació en funció de les restriccions a la presencialitat que imposin les autoritats sanitàries.

Professor/a de contacte

Nom: Ricard Gelabert Peiri

Correu electrònic: Ricard.Gelabert@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

Miquel Moreno Ferrer

Prerequisits

Cal haver aprovat l'assignatura de Fonaments de Química de primer curs de grau. És molt recomanable haver aprovat també les assignatures de Matemàtiques i Física de primer: Els alumnes que no les hagin aprovades i que cursin aquesta assignatura poden topiar amb dificultats especials per superar-la.

Objectius

La química estudia la matèria, les seves propietats, transformacions i la seva interacció amb la radiació electromagnètica. Atès que els elements bàsics que constitueixen la matèria (electrons i nuclis atòmics) no obeeixen les lleis de la mecànica clàssica sinó la poc intuïtiva mecànica quàntica, resulta indispensable aplicar de forma rigorosa els seus principis per tal de derivar les lleis que governen la matèria, la seva estructura, els tipus d'enllaç i les seves transformacions, i veure com tenen importants conseqüències a nivell macroscòpic. Aquest és l'objectiu de la química quàntica com a disciplina dins d'una concepció moderna de la química.

Com a assignatura, el seu primer objectiu és que els alumnes adquireixin l'hàbit de pensar la química usant conceptes mecanoquàntics de forma correcta i això els permeti treure'n conseqüències. Un segon objectiu és que els alumnes interioritzin una explicació rigorosa dels principis fonamentals de la química, que de forma potser mecànica han estat usant en els cursos introductoris de química (en particular aquells que tenen a veure amb l'enllaç). En tercer lloc, els alumnes han de desenvolupar habilitats per l'ús d'eines matemàtiques per resoldre problemes relacionats amb l'estructura atòmica i molecular. En relació amb això darrer, un objectiu important rau en familiaritzar l'alumne amb l'ús d'eines informàtiques de química quàntica, per tal que ho incorpori com una eina més d'estudi de la matèria i les seves propietats.

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

- Part 1: Fonaments de la Mecànica Quàntica. Introducció històrica. Fonaments matemàtics. Postulats de la mecànica quàntica. Principi d'indeterminació de Heisenberg. Sistemes model: partícula en una caixa, oscil·lador harmònic.
- Part 2: Estructura Atòmica. Moment angular. Àtom d'hidrogen. Spin. Àtoms polieletrònics. Principi d'antisimetria. Determinants de Slater. Principi d'Exclusió. Mètodes aproximats: mètode variacional. Principi d'Aufbau. Taula periòdica.
- Part 3: Estructura Molecular. El hamiltonià molecular. Aproximació Born-Oppenheimer. Molècula H_2^+ . Aproximació OM-CLOA. Molècula d' H_2 . Estudis qualitius: molècules diatòmiques i poliatòmiques.

- Part 4: Química Teòrica i Computacional. Determinació de l'Estructura Electrònica. Mètode de Hartree-Fock. Conjunts de base. Correlació electrònica. Mètode d'interacció de configuracions. Mètodes del funcional de la densitat.
- Part 5: Química Teòrica i Computacional. Superfícies d'Energia Potencial. Hipersuperfícies d'energia potencial. Punts estacionaris: mínims i punts de sella. Significat dels punts estacionaris. Localització de punts estacionaris. Aplicacions: estructura molecular, termodinàmica i dinàmica de les reaccions químiques, espectroscòpia.

(En funció de la programació de les sessions pràctiques les Parts 4 i 5 poden ser intercanviades en la seqüència)

Classes Pràctiques

- Pràctica 1. Sistemes Model. Partícula en una caixa, oscil·lador harmònic.
- Pràctica 2. Estructura Electrònica I. Mètode de Hartree-Fock. Conjunts de funcions de base.
- Pràctica 3. Estructura Electrònica II. Optimització de geometries moleculars. Reactivitat química I. Termodinàmica química.
- Pràctica 4. Reactivitat Química II. Dinàmica de reaccions.

Metodologia

La metodologia docent es basa en quatre tipus d'activitats: classes de teoria, classes de problemes, seminaris i sessions pràctiques.

Classes de Teoria. Es tracta d'una assignatura d'elevat contingut teòric. La teoria de l'assignatura s'exposarà per part del professor a l'aula, usant materials de suport allà on calgui. Aquest material estarà a disposició dels alumnes per avançat mitjançant la plataforma Campus Virtual. Addicionalment, es disposa de cert material audiovisual per visualitzar de forma asíncrona, el qual podrà ser usat segons el professor consideri adient de forma complementària o substitutiva a les classes presencials.

Classes de Problemes. La resolució de problemes és un dels principals objectius de l'assignatura. A l'inici del curs es distribuirà a la plataforma Campus Virtual una exhaustiva col·lecció de problemes per tot el curs, juntament amb un formulari i un solucionari. Conforme les classes de teoria es vagin desenvolupant el professor indicarà quins problemes són susceptibles de ser resolts pels alumnes. En sessions periòdiques es procedirà a resoldre alguns d'aquests problemes de forma detallada i extensa a classe.

Seminaris. Es programaran dos seminaris poc abans dels respectius exàmens parcials. A criteri del professor o dels interessos mostrats pels alumnes, es podran utilitzar per resoldre dubtes, aprofundir en determinats aspectes del temari, o dur a terme sessions de discussió a partir de textos, cites o determinats resultats, de manera que es pugui connectar la discussió amb els elements constitutius del temari.

Sessions de Pràctiques. Totes les pràctiques de l'assignatura són pràctiques de simulació i es realitzen en ordinador. S'han programat quatre pràctiques. D'aquestes la primera es durà a terme abans del primer examen parcial i la resta abans del segon. En la primera pràctica els alumnes faran servir programes desenvolupats pel professorat de l'assignatura per simular alguns aspectes dels fonaments de la mecànica quàntica en sistemes models. A les sessions restants els alumnes utilitzaran programari amb llicència per fer càlculs mecanoquàntics d'estructura electrònica de molècules de mida petita i mitjana. En aquesta darrera sèrie de pràctiques s'estudiarà l'estructura molecular, la reactivitat a nivell termodinàmic i la dinàmica de reacció en algunes reaccions senzilles. Una part de les pràctiques inclourà l'estudi d'un cas de reacció individualitzat per cada alumne.

En funció de la situació sanitària i de criteris organitzatius les pràctiques es realitzaran presencialment a les aules d'informàtica del SIDCiB de la UAB o en les mateixes instal·lacions però utilitzant accés remot als ordinadors.

Nota: es reservaran 15 minuts d'una classe, dins del calendari establert pel centre/titulació, per a la complementació per part de l'alumnat de les enquestes d'avaluació de l'actuació del professorat i d'avaluació de l'assignatura/mòdul.

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 Teoria	32	1,28	1, 2, 5, 8, 10, 11, 14
Seminaris	2	0,08	3, 8, 14, 18
Sessions de Pràctiques	20	0,8	1, 2, 3, 7, 8, 10, 11, 12, 14, 15, 16, 17, 18
Tipus: Supervisades			
Treball Pràctic	8	0,32	3, 4, 5, 7, 8, 10, 11, 13, 14, 15, 16, 17, 18
Tipus: Autònomes			
Estudi Personal	44	1,76	7, 11, 15

Avaluació

L'avaluació de l'assignatura es farà a partir de tres contribucions: exàmens escrits, informes de pràctiques i evidències. D'aquestes tres, és requisit per aprovar l'assignatura haver obtingut una nota mínima de 4,0 sobre 10,0 tant als exàmens escrits com a la nota global de pràctiques, per separat. Els alumnes que no assoleixin aquestes notes mínimes no poden aprovar l'assignatura.

- **Exàmens escrits.** Al llarg del curs es programaran tres exàmens escrits: dues proves parcials i una de repesca. A cada prova parcial s'avaluarà el temari cobert durant la part corresponent del curs, mentre que la prova de repesca inclourà tot el temari. Per participar a la prova de repesca cal, com a mínim, que l'alumne s'hagi presentat a un examen parcial, hagi realitzat les pràctiques i entregat al menys una evidència. Un alumne que superi les dues proves parcials individualment no s'ha de presentar a la prova de repesca. En cas contrari s'haurà de presentar obligatòriament a l'examen de repesca. La nota final de l'apartat d'exàmens escrits serà la mitjana dels exàmens parcials per aquells alumnes que superin tots dos, o la de l'examen de repesca per la resta d'alumnes. Per superar s'entén obtenir 4,0 sobre 10,0 punts als exàmens respectius. Extraordinàriament, aquells alumnes que hagin superat ambdues proves parcials i vulguin pujar nota, podran demanar-ho per E-Mail al professor, qui confirmarà la recepció. Aquests alumnes podran llavors realitzar la prova de repesca, tenint en compte que si en acabar la prova la lliuren al professorat, la nota de la prova de repesca substitueix incondicionalment la de les dues proves parcials que han realitzat (és a dir, poden baixar nota).
- **Informes de Pràctiques.** L'assistència a les sessions de pràctiques, la seva realització i la presentació dels informes és obligatòria. Durant la realització de cada pràctica es publicarà un model d'informe per cada pràctica mitjançant la plataforma Campus Virtual. Els informes es lliuraran a títol individual i dins del termini previst. La nota final de practiques serà una mitjana ponderada dels quatre informes, atès que la complexitat de les diferents pràctiques no és uniforme. A criteri del professor es convocarà alumnes concrets per una discussió de les pràctiques o una exposició oral dels resultats i conclusions.
- **Evidències.** Al llarg del curs es proposarà la realització d'evidències relacionades amb el temari que s'hagi anat cobrint. Es tractarà d'exercicis més elaborats que els que s'hagin resolt a classe i que podran requerir de l'ús de coneixements de diferents temes ja estudiats al temari. Els exercicis es lliuraran a títol individual i dins del termini previst. La nota final d'Evidències serà una mitjana ponderada de les notes tenint en compte la dificultat relativa de les propostes.
- **Reptes.** Addicionalment, a criteri del professor es podrà proposar un nombre reduït d'exercicis avançats, de caràcter voluntari. Aquests exercicis avançats tenen per objecte estimular els alumnes que desitgin ampliar coneixements i aprofundir en la matèria. Seran exercicis d'una complexitat superior i podran requerir l'ús dels coneixements donats al curs, coneixements d'altres matèries, consulta de bibliografia especialitzada, o fins i tot l'ús de programari especialitzat per fer simulacions. El

conjunt dels exercicis voluntaris representaran un màxim de 1,0 punt, i la seva contribució serà addicional a la dels altres ítems obligatoris: es fa notar que això pot portar la nota final de curs d'alguns alumnes per sobre de 10,0, en quin cas serà minorada fins aquest valor. En cap cas la nota de la secció «Reptes» eximeix l'alumne d'obtenir una nota mínima de 4,0 sobre 10,0 en la secció d'exàmens escrits i en la secció d'informes de pràctiques.

Activitats d'avaluació

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Evidències	15%	6	0,24	5, 6, 8, 9, 10, 14, 15, 17
Exàmens Escrits (Parcials i de Repesca)	55%	7	0,28	3, 14, 15, 17
Informes de Pràctiques	30%	21	0,84	1, 2, 3, 4, 5, 7, 8, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18

Bibliografia

Bibliografia Bàsica

- J. Bertran, V. Branchadell, M. Moreno, M. Sodupe, *Química Cuántica*, Síntesis, 2000, ISBN: 978-8477387427 (versió electrònica a www.sintesis.com)

Bibliografia Complementària

- I. N. Levine, *Química Cuántica*, 5ª Ed, Prentice Hall, 2001, ISBN: 978-8420530964.
- F. L. Pilar, *Elementary Quantum Chemistry*, 2nd Ed., Dover, 2003. ISBN: 978-04864114645.
- P. W. Atkins, R. Friedman, *Molecular Quantum Mechanics*, 5th Ed., Oxford, 2010. ISBN: 978-0199541423.

Programari

La pràctica 1 utilitza programes desenvolupats pel professorat de l'assignatura, realitzats en Python i usant llibreries de codi obert. Es distribuiran imatges executables del programari per executar-lo en els ordinadors personals dels alumnes, en sistemes operatius Linux i Windows, de manera que no caldrà tenir una instal·lació operativa de Python ni les llibreries per executar-los.

Les pràctiques sobre estructura electrònica (2, 3 i 4) es realitzaran utilitzant els programes GaussView i Gaussian16, de Gaussian, Inc. Aquest programari és propietari, s'utilitza amb llicència i està instal·lat als ordinadors del SIDCiB de la UAB on s'executa sobre Linux. Existeix la possibilitat d'accedir a aquests ordinadors de forma remota en determinades franges horàries i fer-ne ús, fora de les sessions pràctiques programades. El professorat informará de les condicions d'accés fora de les sessions de pràctiques.