

## Química Cuántica

Código: 102503

Créditos ECTS: 6

Titulación	Tipo	Curso	Semestre
2502444 Química	OB	2	1

### Contacto

Nombre: Ricard Gelabert Peiri

Correo electrónico: ricard.gelabert@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

Ricard Gelabert Peiri

Miquel Moreno Ferrer

### Prerequisitos

Es necesario tener aprobada la asignatura "Fonaments de Química" (Fundamentos de Química) de primer curso. Se recomienda tener también aprobadas las asignaturas "Matemàtiques" (Matemáticas) y "Física" (Física) de primer curso. Aquellos alumnos que no las hayan aprobado y cursen "Química Quàntica" (Química Cuántica) pueden toparse con dificultades especiales para superarla.

### Objetivos y contextualización

La química estudia la materia, sus propiedades, transformaciones y su interacción con la radiación electromagnética. Dado que los elementos básicos que constituyen la materia (electrones y núcleos atómicos) no obedecen las leyes de la física clásica sino la poco intuitiva mecánica cuántica, resulta indispensable aplicar de forma rigurosa sus principios para derivar las leyes que gobiernan la materia, su estructura, los tipos de enlace y sus transformaciones, y ver cómo tienen importantes consecuencias a nivel macroscópico. Este es el objetivo de la química cuántica como disciplina dentro de una concepción moderna de la química.

Como asignatura, su primer objetivo es que los alumnos adquieran el hábito de pensar la química usando conceptos mecanocuánticos de forma correcta y puedan extraer consecuencias. Un segundo objetivo es que los alumnos interioricen una explicación rigurosa de los principios básicos de la química, los cuales quizá de forma mecánica han estado usando en los cursos introductorios de química (en particular aquellos que tienen que ver con el enlace). En tercer lugar, los alumnos tienen que desarrollar habilidades para el uso de herramientas matemáticas para resolver problemas relacionados con la estructura atómica y molecular. En relación a esto último, un objetivo importante es el familiarizar al alumno con el uso de herramientas informáticas de química cuántica para que ello sea incorporado como una herramienta más en el estudio de la materia y sus propiedades.

### Competencias

- Adaptarse a nuevas situaciones.
- 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.
- Mantener un compromiso ético.
- Obtener información, incluyendo la utilización de medios telemáticos.
- Operar con un cierto grado de autonomía e integrarse en poco tiempo en el ambiente de trabajo.
- 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.
- 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. Aprender de forma autónoma.
3. Comunicarse de forma oral y escrita en la lengua nativa.
4. Demostrar iniciativa y espíritu emprendedor.
5. Demostrar motivación por la calidad.
6. Describir los principios de la mecánica cuántica y reconocer su aplicación en la descripción de la estructura y las propiedades de átomos y moléculas.
7. Gestionar la organización y planificación de tareas.
8. Gestionar, analizar y sintetizar información.
9. Identificar y analizar problemas relacionados con la estructura de las moléculas.
10. Mantener un compromiso ético.
11. Obtener información, incluyendo la utilización de medios telemáticos.
12. Operar con un cierto grado de autonomía e integrarse en poco tiempo en el ambiente de trabajo.
13. Poseer destreza para el cálculo numérico.
14. Proponer ideas y soluciones creativas.
15. Razonar de forma crítica.
16. Resolver problemas y tomar decisiones.
17. Resumir un texto científico relacionado con la asignatura en lengua inglesa.
18. Utilizar la informática para el tratamiento y presentación de información.

## **Contenido**

### Clases Teóricas

- Parte 1: Fundamentos de Mecánica Cuántica. Introducción histórica. Fundamentos matemáticos. Postulados de la mecánica cuántica. Principio de indeterminación de Heisenberg. Sistemas modelo: partícula en una caja, oscilador armónico.
- Parte 2: Estructura Atómica. Momento angular. Átomo de hidrógeno. Spin. Átomos polielectrónicos. Principio de antisimetría. Determinantes de Slater. Principio de Exclusión. Métodos aproximados: método variacional. Principio de Aufbau. Tabla periódica.

- Parte 3: Estructura Molecular. El hamiltoniano molecular. Aproximación Born-Oppenheimer. Molécula  $H_2^+$ . Aproximación OM-CLOA. Molécula de  $H_2$ . Estudios cualitativos: moléculas diatómicas y poliatómicas.
- Parte 4: Química Teórica y Computacional. Determinación de la Estructura Electrónica. Método de Hartree-Fock. Conjuntos de base. Correlación electrónica. Método de interacción de configuraciones. Métodos del funcional de la densidad.
- Parte 5: Química Teórica y Computacional. Superficies de Energía Potencial. Hipersuperficies de energía potencial. Puntos estacionarios: mínimos y puntos de ensilladura. Significado de los puntos estacionarios. Localización de puntos estacionarios. Aplicaciones: estructura molecular, termodinámica y dinámica de las reacciones químicas, espectroscopia.

*(En función de la programación de las sesiones prácticas las Partes 4 y 5 pueden intercambiarse en la secuencia)*

### Clases Prácticas

- Práctica 1. Sistemas Modelo. Partícula en una caja, oscilador armónico.
- Práctica 2. Estructura Electrónica I. Método Hartree-Fock. Conjuntos de funciones de base.
- Práctica 3. Estructura Electrónica II. Optimización de geometrías moleculares. Reactividad Química I. Termodinámica química.
- Práctica 4. Reactividad Química II. Cinética de reacciones.

### Metodología

La metodología docente se basa en cuatro tipos de actividades: clases de teoría, clases de problemas, seminarios y sesiones prácticas.

- Clases de Teoría. Se trata de una asignatura de alto contenido teórico. La teoría de la asignatura se desarrollará por parte del profesor en el aula, usando materiales de soporte allí donde sea preciso. Este material estará a disposición de los alumnos por adelantado mediante la plataforma Campus Virtual. Adicionalmente se dispone de cierto material audiovisual para visualizar de forma asíncrona, el cual podrá ser usado según considere oportuno el profesor de forma complementaria o substitutiva a las clases presenciales.
- Clases de Problemas. La resolución de problemas es uno de los principales objetivos de la asignatura. Al inicio del curso se distribuirá en la plataforma Campus Virtual una colección completa de problemas para todo el curso, junto a un formulario y un solucionario. Conforme las clases de teoría se vayan desarrollando el profesor indicará qué problemas son susceptibles de ser resueltos por los alumnos. En sesiones periódicas se procederá a resolver algunos de estos problemas de forma detallada y extensa en clase.
- Seminarios. Se programarán dos seminarios antes de los dos exámenes parciales. A criterio del profesor o de los intereses mostrados por los alumnos se podrán utilizar estos seminarios para resolver dudas, profundizar en determinados aspectos del temario, o llevar a cabo sesiones de discusión de textos, citas o determinados resultados, de manera que se pueda conectar la discusión con los elementos constituyentes del temario.
- Sesiones de Prácticas. Todas las prácticas de la asignatura son prácticas de simulación que se llevan a cabo por ordenador. Cuatro prácticas están programadas. De éstas, la primera se llevará a cabo poco antes del primer examen parcial y el resto antes del segundo. En la primera práctica los alumnos utilizarán programas desarrollados por el profesorado de la asignatura para simular determinados aspectos de los fundamentos de la mecánica cuántica en sistemas modelo. En las sesiones restantes

los alumnos usarán *software* con licencia para realizar cálculos mecanocuánticos de estructura electrónica en moléculas de tamaño pequeño y mediano. En esta última serie de prácticas se estudiará la estructura molecular, la reactividad a nivel termodinámico y la dinámica de reacción en algunas reacciones sencillas. Una parte de las prácticas incluirá el estudio de un caso individualizado de reacción para cada alumno.

Nota: se reservarán 15 minutos de una clase dentro del calendario establecido por el centro o por la titulación para que el alumnado rellene las encuestas de evaluación de la actuación del profesorado y de evaluación de la asignatura o módulo.

## Actividades

Título	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
<b>Tipo: Dirigidas</b>			
Clases de Problemas	10	0,4	1, 2, 4, 8, 11, 14, 15, 16, 13
Clases de Prácticas	20	0,8	1, 2, 3, 7, 8, 10, 11, 12, 15, 16, 17, 13, 18
Clases de Teoría	32	1,28	1, 2, 5, 8, 10, 11, 15
Seminarios	2	0,08	3, 8, 15, 18
<b>Tipo: Supervisadas</b>			
Caso Práctico	8	0,32	3, 4, 5, 7, 8, 10, 11, 14, 15, 16, 17, 13, 18
<b>Tipo: Autónomas</b>			
Estudio Personal	44	1,76	7, 11, 16

## Evaluación

La evaluación de la asignatura se realiza a partir de tres contribuciones: exámenes escritos, informes de prácticas y evidencias. De estas tres, es requisito para aprobar la asignatura el haber obtenido una nota mínima de 4,0 sobre 10,0 tanto en los exámenes escritos como en la nota global de prácticas, por separado. Aquellos alumnos que no logren estas notas mínimas no podrán superar la asignatura.

- **Exámenes Escritos.** A lo largo del curso se programarán tres exámenes escritos: dos de ellos parciales y uno de recuperación. Cada prueba parcial evaluará el temario cubierto durante la parte correspondiente del curso, mientras que en la prueba de recuperación cubrirá todo el temario. Para poder participar en la prueba de recuperación es necesario que como mínimo el alumno: se haya presentado a un examen parcial, haya realizado las prácticas y haya entregado como mínimo una evidencia. Aquel alumno que supere las dos pruebas parciales por separado no es necesario que se presente a la prueba de recuperación. En caso contrario deberá presentarse a la misma. La nota final del apartado de exámenes escritos será la media de los exámenes parciales para aquellos alumnos que superen los dos, o la del examen de recuperación para el resto de alumnos. Por "superar" se entiende obtener 4,0 sobre 10,0 puntos en los respectivos exámenes. De forma extraordinaria aquellos alumnos que habiendo superado ambas pruebas parciales deseen subir nota, podrán solicitarlo por E-Mail al profesor con antelación, el cual confirmará la recepción. Estos alumnos podrán realizar el examen de recuperación, teniendo en cuenta que, si entregan su examen de recuperación al profesor la nota del mismo sustituye incondicionalmente las dos pruebas parciales (es decir: pueden bajar nota).
- **Informes de Prácticas.** La asistencia a las sesiones de prácticas, su realización y la presentación de los informes es obligatoria. Durante la realización de cada práctica se publicará un modelo de informe

mediante la plataforma Campus Virtual. Los informes se entregarán a título individual y en el plazo previsto. La nota final de prácticas será una media ponderada de los cuatro informes, atendiendo a la diferente complejidad de cada práctica. A criterio del profesor se podrá convocar a alumnos concretos para una discusión de las prácticas o una exposición oral de resultados y conclusiones.

- **Evidencias.** A lo largo del cuatrimestre se propondrá la realización de evidencias relacionadas con el temario cubierto. Se tratará de ejercicios más elaborados que los resueltos en clase y podrán requerir del uso de conocimientos de temas ya estudiados en el temario. Los ejercicios se entregarán a título individual y en el plazo previsto. La nota final del apartado de evidencias será una media ponderada teniendo en cuenta la dificultad relativa de los ejercicios propuestos.
- **Retos.** Adicionalmente, a criterio del profesor se podrán proponer un número reducido de ejercicios avanzados, de carácter voluntario. Estos ejercicios avanzados tienen por objeto estimular a los alumnos que deseen ampliar conocimientos y profundizar en la materia. Serán ejercicios de complejidad superior y podrán requerir el uso de conocimientos impartidos en el curso, conocimientos de otras materias, consulta de bibliografía especializada o incluso el uso de programas informáticos especializados para realizar simulaciones. El conjunto de ejercicios voluntarios representarán un máximo de 1,0 punto en la nota final, y su contribución será adicional a la de los otros ítems obligatorios: se hace notar que esto podría llevar la nota final de algunos alumnos por encima de 10,0, en cuyo caso la nota será reducida a este valor. En ningún caso la nota de la sección "Retos" eximirá al alumno de obtener una nota mínima de 4,0 sobre 10,0 tanto en la sección de exámenes como en la de informes de prácticas.

## Actividades de evaluación

Título	Peso	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
Evidencias	15%	6	0,24	5, 6, 8, 9, 10, 15, 16, 13
Exámenes Escritos (Parciales y de Recuperación)	55%	7	0,28	3, 15, 16, 13
Informes de Prácticas	30%	21	0,84	1, 2, 3, 4, 5, 7, 8, 11, 12, 14, 15, 16, 17, 13, 18

## Bibliografía

### Bibliografía Básica

- J. Bertran, V. Branchadell, M. Moreno, M. Sodupe, *Química Cuántica*, Síntesis, 2000, ISBN: 978-8477387427 (versión electrónica en [www.sintesis.com](http://www.sintesis.com))

### Bibliografía Complementaria

- I. N. Levine, *Química Cuántica*, 5<sup>a</sup> 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.

## Software

La práctica 1 utiliza programas desarrollados por el profesorado de la asignatura, usando Python y librerías de código abierto. Se distribuirán imágenes ejecutables de estos programas para ejecutarlos bajo sistemas operativos Linux y Windows, de forma que no será necesario tener una instalación previa de Python ni de las librerías para ejecutarlos.

Las prácticas de estructura electrónica (2, 3 y 4) se realizarán con los programas GaussView y Gaussian 16, de Gaussian, Inc. Este software se utiliza bajo licencia y está instalado en los ordenadores del SIDCiB de la UAB, donde se ejecuta bajo Linux.