

Fenòmens Quàntics I

Codi: 103287
Crèdits: 6

Titulació	Tipus	Curs	Semestre
2501922 Nanociència i Nanotecnologia	OB	3	1

Professor/a de contacte

Nom: Agustí Lledos Falco

Correu electrònic: agusti.lledos@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

Altres indicacions sobre les llengües

Les transparències i la major part d'enunciats dels problemes del curs son en anglès

Prerequisits

Es recomanable haver aprovat les assignatures "Enllaç Químic i Estructura de la Matèria", "Mecànica i Ones" i "Física Clàssica".

Objectius

Adquisició de coneixements bàsics de Mecànica Quàntica i de la seva aplicació per simular i analitzar les propietats de la matèria a l'escala nanomètrica. El curs està organitzat en tres unitats. A la primera s'introdueixen els fonaments de la descripció quàntica de la matèria. Una segona unitat desenvolupa, introduint aproximacions, aquests fonaments per a convertir-los en una potent maquinària per al càlcul. En la tercera part es mostren les seves aplicacions en la simulació de sistemes nanoscòpics.

Competències

- Aplicar els conceptes, principis, teories i fets fonamentals relacionats amb la nanociència i la nanotecnologia a la resolució de problemes de natura quantitativa o qualitativa en l'àmbit de la nanociència i la nanotecnologia.
- Aprendre de manera autònoma.
- Comunicar-se oralment i per escrit en la llengua pròpia.
- Demostrar que es comprenen els conceptes, principis, teories i fets fonamentals relacionats amb la nanociència i la nanotecnologia.
- Gestionar l'organització i la planificació de tasques.
- Interpretar les dades obtingudes mitjançant mesures experimentals, incloent-hi l'ús d'eines informàtiques, identificar-ne el significat i relacionar-les amb les teories químiques, físiques o biològiques apropiades.
- Obtenir, gestionar, analitzar, sintetitzar i presentar informació, incluent-hi la utilització de mitjans telemàtics i informàtics.

- Proposar idees i solucions creatives.
- Raonar de forma crítica.
- Reconèixer els termes relatius als àmbits de la física, la química, la biologia, la nanociència i la nanotecnologia en llengua anglesa i fer servir l'anglès de manera eficaç per escrit i oralment en l'àmbit laboral.
- Reconèixer i analitzar problemes físics, químics i biològics en l'àmbit de la nanociència i la nanotecnologia i plantejar respostes o treballs adequats per a la seva resolució, incloent-hi en els casos necessaris l'ús de fonts bibliogràfiques.
- Resoldre problemes i prendre decisions.

Resultats d'aprenentatge

1. Analitzar situacions i problemes en l'àmbit de la física i plantejar respostes o treballs de tipus experimental utilitzant fonts bibliogràfiques.
2. Aplicar els continguts teòrics adquirits a l'explicació de fenòmens experimentals.
3. Aplicar l'equació de Schroedinger a sistemes quàntics unidimensionals com pous de potencial i/o oscil·ladors i a tridimensionals com molècules.
4. Aprendre de manera autònoma.
5. Avaluar els resultats experimentals de manera crítica i deduir-ne el significat.
6. Comunicar-se oralment i per escrit en la llengua pròpia.
7. Emprar la tecnologia de la informació i la comunicació per a la documentació de casos i problemes.
8. Exposar informes breus sobre la matèria en anglès.
9. Fer cerques bibliogràfiques de documentació científica.
10. Gestionar l'organització i la planificació de tasques.
11. Indicar les bases físiques de la mecànica quàntica i relacionar-les amb fets experimentals.
12. Interpretar textos i bibliografia en anglès sobre física i materials a nivell bàsic.
13. Obtenir, gestionar, analitzar, sintetitzar i presentar informació, incluent-hi la utilització de mitjans telemàtics i informàtics.
14. Proposar idees i solucions creatives.
15. Raonar de forma crítica.
16. Reconèixer els termes relatius a la física i els materials.
17. Reconèixer en processos fisicoquímics els fenòmens d'intercanvis d'energia i les lleis que els governen.
18. Reconèixer la dualitat ona-partícula.
19. Redactar informes sobre la matèria en anglès.
20. Relacionar les propietats dels àtoms i molècules amb la mecànica quàntica.
21. Resoldre l'equació de Schrödinger per a problemes unidimensionals i ser capaç de calcular l'efecte túnel en diversos sistemes físics.
22. Resoldre problemes amb l'ajuda de bibliografia complementària proporcionada.
23. Resoldre problemes i prendre decisions.
24. Utilitzar correctament les eines informàtiques necessàries per a calcular, representar gràficament i interpretar les dades obtingudes, així com la seva qualitat.
25. Utilitzar programes de tractament de dades per elaborar informes.

Continguts

I. Fonaments

Introducció històrica

1.1 Model de Bohr

1.2 Dualitat ona-partícula

1.3 Elements de matemàtiques

1.4 Postulats de la Mecànica Quàntica

1.5 Principi d'Incertesa de Heisenberg

Aplicació a sistemes amb solució analítica

1.6 Partícula en una caixa

1.7 Oscil·lador harmònic

1.8 Rotor rígid

1.9 Àtom d'hidrogen

1.10 Moment angular

1.11 Orbitals atòmics

1.12 Spin

II. Maquinària

2.1 Àtoms polieletrònics (l'àtom d'heli)

2.2 Antisimetria: Principi de Pauli

2.3 Determinants de Slater

2.4 Mètodes aproximats: Teoria de Variacions i Teoria de Pertorbacions

2.5 Estructura electrònica molecular

2.6 Aproximació de Born-Oppenheimer

2.7 Aproximació d'Orbitals Moleculars (OM)

2.8 El mètode autoconsistent de Hartree-Fock (HF-SCF)

2.9 Bases d'orbitals atòmics

2.10 Correlació electrònica

2.11 Mes enllà del mètode Hartree-Fock: mètodes post-HF

2.12 Teoria del Funcional de la Densitat (DFT)

2.13 Funcionals de bescanvi-correlació

2.14 Errors i precisió en química computacional

III. Aplicacions

3.1 Aplicació de la Mecànica Quàntica a la simulació molecular

3.2 Models i aproximacions

3.3 Simulacions atomístiques

3.4 Què es pot calcular?

3.5 Estructures i reaccions: Superfícies d'Energia Potencial. Optimització de la geometria. Càlcul de propietats moleculars

3.6 Simulació de sistemes complexos. Mètodes híbrids QM/MM

3.7 Què s'obté dels càlculs: exemples reals

Classes pràctiques (Laboratori computacional)

Pràctica 1. Estructura electrònica molecular. Mètode Hartree-Fock. Conjunts de base. Termoquímica.

Pràctica 2. Interaccions supramoleculares. Mètodes DFT. Influència de la correlació electrònica i la dispersió.

Pràctica 3. Simulació de reaccions químiques: superfícies d'energia potencial. Mínims i estats de transició.

Metodologia

Classes de teoria

El professor/a explicarà el contingut del programa amb suport audiovisual. Es disposarà de material de suport per als alumnes al Campus Virtual.

Classes de problemes

Les classes de problemes serviran per consolidar i veure'n com es porten a la pràctica els coneixements adquirits en les classes de teoria. S'aniran intercalant amb les classes de teoria per reforçar-ne aspectes determinats o en acabar les unitats temàtiques. Els alumnes disposaran dels enunciats dels exercicis que hauran d'anar resolent al llarg del curs. El plantejament/resolució dels exercicis es farà a les classes de problemes sota la direcció del professor.

Sessions de pràctiques

Les sessions pràctiques (Laboratori Computacional) es duran a terme a l'aula informàtica. Els/les alumnes utilitzaran programes de càlcul que apliquen la metodologia de la Mecànica Quàntica per estudiar l'estructura i evolució de sistemes nanoscòpics.

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, 3, 11, 17, 18, 20, 21, 22, 23
Classes de teoria	28	1,12	3, 11, 17, 18, 20, 21
Sessions de pràctiques	12	0,48	2, 4, 5, 7, 15, 23, 25
Tipus: Supervisades			
Presentació oral	4	0,16	1, 2, 5, 7, 8, 9, 10, 12, 13, 15, 16, 19, 22
Tipus: Autònomes			
Estudi	68	2,72	3, 4, 11, 14, 15, 17, 18, 20, 21, 22

Avaluació

Exàmens escrits: Suposaran el 70% de la nota. Es programaran dos exàmens parcials al llarg del curs i un examen de recuperació. Els dos exàmens parcials tenen el mateix pes (35%). Cal tenir una nota igual o superior a 4 (sobre 10) a cada parcial per poder aprovar l'assignatura sense anar a l'examen de recuperació.

En cas de no haver arribat a una nota de 4 a un o els dos parcials caldrà fer l'examen de recuperació. Aquest exàmen és només per a recuperació i comprèn tota la matèria del curs. Per poder participar a l'exàmen de recuperació serà obligatori haver fet, com a mínim, un dels dos exàmens parcials, a més de les pràctiques i la presentació oral. Caldrà obtenir un mínim de 4 punts (sobre 10) a l'exàmen de recuperació per poder aprovar l'assignatura. Podran optar a la qualificació de "Matrícula d'Honor" els alumnes que hagin obtingut una nota igual o superior a 8 als dos examens parcials.

Pràctiques: Suposaran el 15% de la nota. Els alumnes hauran de contestar les preguntes formulades en els guions de les pràctiques. L'assistència a les sessions de pràctiques i la presentació dels informes es obligatori.

Presentació oral d'un article: Suposarà el 15% de la nota. Cap al final del curs els alumnes realitzaran per grups un treball consistent en cercar, a les revistes de més impacte del camp de les Nanociències, i exposar-ho publicament a tota la classe, un article recent en el que els càlculs quàntics siguin una part important dels resultats. Cada grup disposarà d'un temps de presentació i hi haurà també un torn de preguntes. La presentació oral es obligatòria.

Activitats d'avaluació

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Exàmens escrits (parcials o recuperació)	70%	8	0,32	2, 3, 5, 6, 11, 15, 17, 18, 20, 21, 22, 23
Informes de pràctiques	15%	10	0,4	2, 3, 4, 5, 6, 7, 9, 10, 11, 13, 17, 18, 20, 21, 22, 23, 24, 25
Presentació oral d'un article	15%	10	0,4	1, 2, 3, 4, 5, 7, 8, 9, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23

Bibliografia

"Quantum Chemistry" sixth edition, Ira N. Levine, Prentice Hall, 2009. ISBN: 9780199541423. Existeix una versió espanyola de la cinquena edició.

"Molecular Quantum Mechanics" fifth edition, Peter Atkins, Ronald Friedman, Oxford University Press, 2010. ISBN 019-927498-3.

"Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models", second edition, Christopher J. Cramer, Wiley, 2004. ISBN: 0 470 09181 9.

"Química Cuántica", Joan Bertran, Vicenç Branchadell, Miquel Moreno, Mariona Sodupe, Editorial Síntesis, 2000. ISBN: 84 7738 742 7.

"Introduction to Quantum Mechanics" third edition, David J. Griffiths, Darrell F. Schroeter, Cambridge University Press, 2018. ISBN: 9781107189638.

"Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods", Richard M. Martin, Cambridge University Press, 2004. ISBN: 0 521 78285 6

"Computational Chemistry", Jeremy Harvey, Oxford University Press, 2018, ISBN: 9780198755500

Programari

Les pràctiques del Laboratori Computacional es duran a terme amb el programa Gaussian 16 pels càlculs i Gausview 6 per la construcció i visualització de molècules.