

Química Quàntica

Codi: 102503

Crèdits: 6

Titulació	Tipus	Curs	Semestre
2502444 Química	OB	2	1

Professor/a de contacte

Nom: Ricard Gelabert Peiri

Correu electrònic: ricard.gelabert@uab.cat

Idiomes dels grups

Podeu accedir-hi des d'aquest [enllaç](#). Per consultar l'idioma us caldrà introduir el CODI de l'assignatura. Tingueu en compte que la informació és provisional fins a 30 de novembre de 2023.

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 i les alumnes que no les hagin aprovades i que cursin aquesta assignatura es trobaran 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 de 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 l'alumnat adquireixi l'hàbit de pensar la química usant conceptes mecanoquàntics de forma correcta i això els permeti treure'n conseqüències. Un segon objectiu és que 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, l'alumnat ha 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'alumnat 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. Cinètica 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 professorat a l'aula, usant materials de suport allà on calgui. Aquest material estarà a disposició de l'alumnat 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 professorat 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 professorat indicarà quins problemes són susceptibles de ser resolts per l'alumnat. 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 professorat o dels interessos mostrats per l'alumnat, 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 l'alumnat farà 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 l'alumnat utilitzarà 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.

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			
Cas 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

Avaluació Continuada

L'avaluació de l'assignatura es farà a partir de tres contribucions: Continguts Teòrics, Continguts Pràctics i Evidències. D'aquestes tres, és requisit per aprovar l'assignatura haver obtingut una nota mínima de 4,0 sobre 10,0 tant als Continguts Teòrics com als Continguts Pràctics, per separat. Qui no assoleixi aquestes notes mínimes no pot aprovar l'assignatura.

- Continguts Teòrics. El pes a la nota final dels Continguts Teòrics és del 60%. La nota d'aquests continguts reflecteix els coneixements teòrics de la matèria assolits per l'alumnat i la seva capacitat per aplicar-lo a la resolució de problemes. 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 o l'alumna s'hagi presentat a un examen parcial, hagi realitzat les pràctiques i entregat al menys una evidència. Aquell qui superi els Continguts Teòrics

mitjançant parcials 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 de Continguts Teòrics serà la mitjana ponderada dels exàmens parcials (amb un pes del 60% pel primer parcial i del 40% pel segon parcial) si aquesta nota és com a mínim de 4,0 sobre 10,0. Cas contrari la nota serà la de l'examen de repesca Extraordinàriament, aquells alumnes que hagin superat els Continguts Teòrics per parcials i vulguin pujar nota, podran demanar-ho per E-Mail al professorat, qui en 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).

- Continguts Pràctics. Els Continguts Pràctics contribueixen en un 30% a la nota final de l'assignatura. L'assistència a les sessions de pràctiques és obligatòria. La nota de Continguts Pràctics consta de dues parts amb un pes del 50% cadascuna: d'una banda la nota que s'obtingui de la correcció dels informes, i de l'altra la nota d'un examen breu sobre les pràctiques.
 - 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 professorat es convocarà alumnes concrets per una discussió de les pràctiques o una exposició oral dels resultats i conclusions.
 - El dia de la realització del 2ⁿ examen parcial l'alumnat rebrà també l'enunciat d'una prova escrita de curta durada sobre les pràctiques.

Per optar a aprovar l'assignatura és necessari obtenir un 4,0 sobre 10,0 en els Continguts Pràctics, calculats amb un pes del 50% dels informes i un 50% de la nota de la prova escrita de pràctiques. Aquesta nota no és recuperable.

- Evidències. El pes a la nota final de les Evidències és del 10%. 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 professorat es podrà proposar un nombre reduït d'exercicis avançats, de caràcter voluntari. Aquests exercicis avançats tenen per objecte estimular l'alumnat que desitgi 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 representarà un màxim de 1,0 punt sobre 10,0 en funció del nombre total de reptes proposats, i la seva contribució serà addicional a la dels altres ítems obligatoris: es fa notar que això pot portar la nota final de curs per sobre de 10,0, en quin cas serà minorada fins aquest valor. En cap cas la nota de la secció «Reptes» eximeix cap alumne o alumna d'obtenir una nota mínima de 4,0 sobre 10,0 tant a l'apartat de Continguts Teòrics com al de Continguts Pràctics

Avaluació Única

Es fa constar explícitament que la realització de les pràctiques, el lliurament dels informes i la realització de la prova escrita de pràctiques, són obligatoris, en igualtat de condicions amb l'alumnat que segueix avaluació continuada.

L'alumnat que s'hagi acollit a la modalitat d'avaluació única haurà de realitzar dues proves escrites el mateix dia en què l'alumnat d'avaluació contínua fa l'examen del segon parcial:

- La primera de les proves consistirà en un examen de tot el temari teòric i de problemes de l'assignatura. La nota d'aquest examen serà la seva nota de Continguts Teòrics.

- La segona de les proves serà un examen curt basat en el contingut de les pràctiques. La nota de Continguts Pràctics es calcula igual que per l'alumnat d'avaluació contínua: 50% de la correcció d'informes de pràctiques i 50% de l'examen de pràctiques.

Per optar a aprovar l'assignatura cal obtenir una nota mínima de 4,0 sobre 10,0 tant als Continguts Teòrics com als Continguts Pràctics. Quan aquest sigui el cas la nota final de l'assignatura es calcula segons la fórmula següent:

$$\text{Nota final} = (70 \times \text{Continguts Teòrics} + 30 \times \text{Continguts Pràctics}) / 100$$

Quan la nota final obtinguda segons la fórmula anterior no arribi a 5,0 o bé la nota de Continguts Teòrics no arribi a 4,0 es disposa d'una segona oportunitat per superar l'assignatura mitjançant l'examen de recuperació que se celebrarà en la data que fixi la Coordinació de la Titulació. En aquesta prova es podrà recuperar únicament el 70% de la nota corresponent als Continguts Teòrics. La part de Continguts Pràctics no és recuperable: Quino obtingui una nota mínima de 4,0 sobre 10,0 en la seva qualificació de Continguts Pràctics no pot superar l'assignatura.

Activitats d'avaluació continuada

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Continguts Pràctics	30%	21	0,84	1, 2, 3, 4, 5, 7, 8, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18
Evidències	10%	6	0,24	5, 6, 8, 9, 10, 14, 15, 17
Examins Escrits (Parcials i de Repesca)	60%	7	0,28	3, 14, 15, 17

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 distribuïran imatges executables del programari per executar-lo en els ordinadors personals de l'alumnat, 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 Gaussian 16, 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.