

Titulació	Tipus	Curs
2504602 Nanociència i Nanotecnologia	OB	2

Professor/a de contacte

Nom: Xavier Solans Monfort

Correu electrònic: xavier.solans@uab.cat

Equip docent

Giuseppe Sciortino

Idiomes dels grups

Podeu consultar aquesta informació al [final](#) del document.

Prerequisits

Tot i que l'assignatura no té uns prerequisits específics, es recomanable haver aprovat les assignatures "Enllaç Químic i Estructura de la Matèria", "Física General: Mecànica i Ones" i "Fonaments de matemàtiques".

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.

Resultats d'aprenentatge

1. CM16 (Competència) Aplicar els coneixements físics a la resolució de problemes en la nanoescala.
2. KM29 (Coneixement) Reconèixer els principis de la mecànica quàntica i la seva aplicació en la descripció de l'estructura i les propietats de la matèria a escala atòmica i molecular.
3. KM29 (Coneixement) Reconèixer els principis de la mecànica quàntica i la seva aplicació en la descripció de l'estructura i les propietats de la matèria a escala atòmica i molecular.
4. SM27 (Habilitat) Aplicar les eines de la física quàntica i del càlcul computacional a sistemes senzills.
5. SM28 (Habilitat) Reunir, sintetitzar i presentar resultats i conclusions de publicacions científiques.

6. SM28 (Habilitat) Reunir, sintetitzar i presentar resultats i conclusions de publicacions científiques.

Continguts

1. Fonaments

1.1. Postulats de la mecànica quàntica

Introducció històrica. Elements de matemàtiques. Postulats de la Mecànica Quàntica. Principi d'Incertesa de Heisenberg.

1.2. Aplicació a sistemes amb solució analítica:

Partícula en una Caixa, Oscil·lador harmònic, Rotor rígid

1.3. Estructura atòmica.

Àtom d'hidrogen. Moment angular. Orbitals atòmics. Spin. Àtoms polieletrònics (l'àtom d'heli). Antisimetria: Principi de Pauli. Determinants de Slater. Mètodes aproximats: Teoria de Variacions i Teoria de Pertorbacions

2. Maquinària

2.1 Estructura electrònica molecular

Aproximació de Born-Oppenheimer. Aproximació d'Orbitals Moleculars (OM). El mètode autoconsistent de Hartree-Fock (HF-SCF). Bases d'orbitals atòmics. Mes enllà del mètode Hartree-Fock: mètodes post-HF.

2.2 Teoria del Funcional de la Densitat (DFT)

Teoremes de Hohenberg i Kohn. Aproximació de Kohn-Sham. Funcionals de bescanvi-correlació. Limitacions conegudes dels mètodes DFT. Errors i precisió en química computacional

3. Aplicacions

3.1 Aplicació de la Mecànica Quàntica a la simulació molecular.

Models i aproximacions. Simulacions atomístiques. Estructures i reaccions: Superfícies d'Energia Potencial. Optimització de la geometria. Càlcul de propietats moleculars

3.2 Simulació de sistemes complexos.

Mecànica molecular. Mètodes híbrids QM/MM. Simulació de materials.

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.

Activitats formatives i Metodologia

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
-------	-------	------	--------------------------

Tipus: Dirigides

Classes de Teoria	30	1,2	KM29
Classes de problemes	15	0,6	CM16, SM27
Pràctiques computacionals	8	0,32	SM27, SM28
Tipus: Autònomes			
Estudi	75	3	CM16, KM29, SM27

La metodologia docent es basa en tres tipus d'activitats: classes de teoria, classes de problemes 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 facilitarà material addicional per afavorir l'estudi de l'alumnat.
- **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. En sessions periòdiques es procedirà a resoldre alguns d'aquests problemes de forma detallada i extensa a classe.
- **Sessions de Pràctiques.** Totes les pràctiques de l'assignatura són pràctiques de simulació i es realitzen en ordinador. S'han programat tres pràctiques. 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.

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.

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.

Avaluació

Activitats d'avaluació continuada

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Evidències	15%	5	0,2	CM16, KM29
Exàmens	70%	8	0,32	CM16, KM29, SM27
Informes de pràctiques	15%	9	0,36	CM16, SM27, SM28

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 4,5 sobre 10,0 en els exàmens escrits i un 5.0 de nota global de l'assignatura. Qui no assoleixi aquestes nota mínima no aprova l'assignatura. La nota global de l'assignatura es calcula com:

Nota de l'assignatura= (Parcials · 7.0 + Pràctiques · 1.5 + Evidències ·1.5)/100

- Continguts Teòrics: Exàmens parcials (70% de la nota final)

Es programaran dos exàmens parcials escrits. Cada examen parcial tindrà el mateix pes en la nota final (35%). La nota d'aquests exàmens pretén reflectir els coneixements teòrics de la matèria assolits per l'alumnat i la seva capacitat per aplicar-lo a la resolució de problemes. A cada prova parcial s'avaluarà el temari cobert durant la part corresponent del curs.

L'alumnat que obtingui més d'un 4.5 de les dues proves parcials i amb això assoleixi un 5.0 de nota global del curs, no s'ha de presentar a la prova de recuperació. En cas contrari s'haurà de presentar obligatòriament a l'examen de recuperació. Tot i així, cal tenir en compte que per participar a la prova de recuperació cal, com a mínim, que l'alumne/alumna s'hagi presentat a un examen parcial, hagi realitzat les pràctiques i entregat al menys una evidència.

La prova de recuperació serà única i inclourà temari dels dos parcials. No es podrà assistir a aquesta prova final per pujar nota. A més, podran optar a la qualificació de "Matrícula d'Honor" els/les alumnes que hagin obtingut una nota igual o superior a 8 als dos exàmens parcials.

- Continguts Pràctics. Informes de practiques (15% a la nota final).

L'assistència a les sessions de pràctiques és obligatòria. La nota de Continguts Pràctics ve determinada per la correcció dels informes de practiques. La nota final de dels informes de practiques serà una mitjana ponderada dels informes.

Aquesta nota no és recuperable.

- Evidències. (15% de la nota final).

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. La nota final d'Evidències serà una mitjana ponderada de les notes.

Avaluació Única

L'assistència a les sessions de pràctiques i la presentació dels informes es obligatori per a tots els/les alumnes independentment de la modalitat d'avaluació a la que s'acullin. A més, l'alumnat que s'hagi acollit a la modalitat d'avaluació única haurà de realitzar una prova final que consistirà en un examen de tot el temari teòric, de problemes i de les evidències de l'assignatura. Aquesta prova es realitzarà el dia enquè els estudiants d'avaluació contínua fan l'examen del segon parcial. La qualificació de l'estudiant serà:

Nota de l'assignatura= (Examen · 8.5 + Pràctiques · 1.5)/100

Si la nota de l'examen no arriba al 4.5 o bé, la nota global no arriba a 5, l'estudiant té una altra oportunitat de superar l'assignatura mitjançant un examen de recuperació. Aquest se celebrarà en la data que fixi la coordinació de la titulació. En aquesta prova es podrà recuperar el 70% de la nota corresponent a la part de la teoria i problemes. Les altres activitats avaluatives no son recuperables.

Bibliografia

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

"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.

"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.

Llista d'idiomes

Nom	Grup	Idioma	Semestre	Torn
(PAUL) Pràctiques d'aula	1	Català	primer quadrimestre	tarda
(PLAB) Pràctiques de laboratori	1	Espanyol	primer quadrimestre	matí-mixt
(PLAB) Pràctiques de laboratori	2	Espanyol	primer quadrimestre	matí-mixt
(TE) Teoria	1	Català	primer quadrimestre	tarda