

Fenòmenos Cuánticos I

Código: 106816

Créditos ECTS: 6

2024/2025

Titulación	Tipo	Curso
2504602 Nanociencia y Nanotecnología	OB	2

Contacto

Nombre: Xavier Solans Monfort

Correo electrónico: xavier.solans@uab.cat

Equipo docente

Giuseppe Sciortino

Idiomas de los grupos

Puede consultar esta información al [final](#) del documento.

Prerrequisitos

Si bien la asignatura no tiene requisitos específicos, es muy recomendable tener aprobadas las asignaturas de "Enllaç Químic i Estructura de la Matèria", "Física General: Mecànica i Ones" i "Fonaments de matemàtiques".

Objetivos y contextualización

Adquisición de conocimientos básicos de mecánica cuántica y de sus aplicaciones para simular y analizar las propiedades de la materia a la escala nanométrica. El curso está organizado en tres unidades. A la primera se introducen los fundamentos de la descripción cuántica de la materia. Una segunda unidad desarrolla, introduciendo las aproximaciones necesarias, estos fundamentos para convertirlos en una potente maquinaria para el cálculo. En la tercera parte se muestran sus aplicaciones en la simulación de sistemas nanoscópicos.

Resultados de aprendizaje

1. CM16 (Competencia) Aplicar los conocimientos físicos a la resolución de problemas en la nanoscal
2. KM29 (Conocimiento) Reconocer los principios de la mecánica cuántica y su aplicación en la descripción de la estructura y propiedades de la materia a escala atómica y molecular.
3. KM29 (Conocimiento) Reconocer los principios de la mecánica cuántica y su aplicación en la descripción de la estructura y propiedades de la materia a escala atómica y molecular.

4. SM27 (Habilidad) Aplicar las herramientas de la física cuántica y del cálculo computacional a sistemas sencillos.
5. SM28 (Habilidad) Reunir, sintetizar y presentar resultados y conclusiones de publicaciones científicas.
6. SM28 (Habilidad) Reunir, sintetizar y presentar resultados y conclusiones de publicaciones científicas.

Contenido

1. Fundamentos

1.1. Postulados de la mecánica cuántica

Introducción histórica. Elementos de matemáticas. Postulados de la Mecánica Cuántica. Principio de Incertidumbre de Heisenberg.

1.2. Aplicación a sistemas con solución analítica

Partícula en una Caja, Oscilador armónico, Rotor rígido

1.3. Estructura atómica.

Átomo de hidrógeno. Momento angular. Orbitales atómicos. Spin. Átomos polielectrónicos (el átomo de helio).

Antisimetría: Principio de Pauli. Determinantes de Slater. Métodos aproximados: Teoría de Variaciones y Teoría de Perturbaciones

2. Maquinaria

2.1 Estructura electrónica molecular

Aproximación de Born-Oppenheimer. Aproximación de Orbitales Moleculares (OM). El método autoconsistente de Hartree-Fock (HF-SCF). Bases de orbitales atómicos. Más allá del método Hartree-Fock: métodos post-HF.

2.2 Teoría del Funcional de la Densidad (DFT)

Teoremas de Hohenberg y Kohn. Aproximación de Kohn-Sham. Funcionales de intercambio y correlación.

Limitaciones conocidas de los métodos DFT. Errores y precisión en química computacional

3. Aplicaciones

3.1 Aplicación de la Mecánica Cuántica en la simulación molecular.

Modelos y aproximaciones. Simulaciones atomísticas. Estructuras y reacciones: Superficies de Energía Potencial. Optimización de la geometría. Cálculo de propiedades moleculares

3.2 Simulación de sistemas complejos.

Mecánica molecular. Métodos híbridos QM/MM. Simulación de materiales.

Clases prácticas (Laboratorio computacional)

Práctica 1. Estructura electrónica molecular. Método Hartree-Fock. Conjuntos de base. Termoquímica.

Práctica 2. Interacciones supramoleculares. Métodos DFT. Influencia de la correlación electrónica y la dispersión.

Práctica 3. Simulación de reacciones químicas: superficies de energía potencial. Mínimos y estados de transición.

Actividades formativas y Metodología

Título	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
Tipo: Dirigidas			
Clases de problemas	15	0,6	CM16, SM27, CM16
Clases de teoría	30	1,2	KM29, KM29
Prácticas computacionales	8	0,32	SM27, SM28, SM27
Tipo: Autónomas			
Estudio	75	3	CM16, KM29, SM27, CM16

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

• Clases de Teoría: Se trata de una asignatura de elevado contenido teórico. La teoría de la asignatura se detallará en clases magistrales por parte del profesorado, usando materiales de apoyo donde sea necesario. Este material estará a disposición del alumnado por adelantado mediante la plataforma Campus Virtual. Adicionalmente, se facilitará material adicional para facilitar el estudio del alumnado

• 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 exhaustiva colección de problemas para todo el curso, junto con un formulario y un solucionario. En sesiones periódicas se procederá a resolver algunos de estos problemas de forma detallada y extensa en clase.

• Sesiones de Prácticas: Todas las prácticas de la asignatura son prácticas de simulación y se realizan en ordenador. Se han programado tres prácticas. El alumnado utilizará software con licencia para realizar cálculos mecanocuánticos de estructura electrónica de moléculas de pequeño y mediano tamaño. Se estudiará la estructura molecular, la reactividad a nivel termodinámico y la dinámica de reacción en algunas sencillas reacciones.

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

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.

Evaluación

Actividades de evaluación continuada

Título	Peso	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
Evidencias	15%	5	0,2	CM16, KM29
Exámenes	70%	8	0,32	CM16, KM29, SM27
Informes de prácticas	15%	9	0,36	CM16, SM27, SM28

La evaluación de la asignatura se realizará a partir de tres cualificaciones distintas: exámenes escritos, informes de prácticas y evidencias. De estas tres es requisito para aprobar la asignatura haber obtenido una nota mínima de 4,5 sobre 10,0 en los exámenes escritos y un 5,0 de nota global de la asignatura. Quien no alcance estas notas mínimas no aprueba la asignatura. La nota global de la asignatura se calcula como:

Nota de la asignatura = (Parciales · 7.0 + Prácticas · 1.5 + Evidencias · 1.5)/100

• Contenidos Teóricos: Exámenes parciales (70% de la nota final)

Se programarán dos exámenes parciales escritos. Cada examen parcial tendrá el mismo peso en la nota final (35%). La nota de estos exámenes pretende reflejar los conocimientos teóricos de la materia adquiridos por el alumnado y su capacidad para aplicarlo en la resolución de problemas. En cada prueba parcial se evaluará el temario cubierto durante la parte correspondiente del curso.

El alumnado que obtenga más de un 4.5 de las dos pruebas parciales y con ello alcance un 5.0 de nota global del curso, no debe presentarse en la prueba de recuperación. En caso contrario deberá presentarse obligatoriamente en el examen de recuperación. Sin embargo, hay que tener en cuenta que para participar en la prueba de recuperación es necesario, como mínimo, que el alumno/a se haya presentado a un examen parcial, haya realizado las prácticas y entregado al menos una evidencia.

La prueba de recuperación será única e incluirá temario de ambos parciales. No se podrá asistir a esta prueba final para subir nota. Además, podrán optar a la calificación de "Matrícula de Honor" los alumnos/as que hayan obtenido una nota igual o superior a 8 en los dos exámenes parciales.

- Contenidos Prácticos. Informes de prácticas (15% en la nota final).

La asistencia a las sesiones de prácticas es obligatoria. La nota de Contenidos Prácticos viene determinada por la corrección de los informes de prácticas. La nota final de los informes de prácticas será una media ponderada de los informes.

Esta nota no será recuperable.

- Evidencias. (15% de la nota final).

A lo largo del curso se propondrá la realización de evidencias relacionadas con el temario que se haya impartido hasta ese momento. Se tratará de ejercicios más elaborados que los que se hayan resuelto en clase y que podrán requerir el uso de conocimientos de distintos temas ya estudiados en el temario. La nota final de Evidencias será una media ponderada de las notas.

Evaluación Única

La asistencia a las sesiones de prácticas y la presentación de los informes es obligatoria para todos los alumnos independientemente de la modalidad de evaluación a la que se acojan. Además, el alumnado que se haya acogido en la modalidad de evaluación única deberá realizar una prueba final que consistirá en un examen de todo el temario teórico, de problemas y de las evidencias de la asignatura. Esta prueba se realizará el día en que los estudiantes de evaluación continua realizan el examen del segundo parcial. La calificación del estudiante será:

Nota de la asignatura= (Examen · 8.5 + Prácticas · 1.5)/100

Si la nota del examen no llega a 4.5 o bien, la nota global no llega a 5, el estudiante tiene otra oportunidad de superar la asignatura mediante un examen de recuperación. Éste se celebrará en la fecha que fije la coordinación de la titulación. En esta prueba se podrá recuperar el 70% de la nota correspondiente a la parte de la teoría y problemas. Las demás actividades evaluativas no son recuperables.

Bibliografía

"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

Software

Las prácticas del Laboratorio Computacional se llevarán a cabo con el programa Gaussian 16 por los cálculos y Gausview 6 por la construcción y visualización de moléculas.

Lista de idiomas

Nombre	Grupo	Idioma	Semestre	Turno
(PAUL) Prácticas de aula	1	Catalán	primer cuatrimestre	tarde
(PLAB) Prácticas de laboratorio	1	Español	primer cuatrimestre	mañana-mixto
(PLAB) Prácticas de laboratorio	2	Español	primer cuatrimestre	mañana-mixto
(TE) Teoría	1	Catalán	primer cuatrimestre	tarde