

FITXA INFORMATIVA DE CONFERÈNCIA

CICLE DE CONFERÈNCIES: Fronteres de la Química 2022-2023

Títol de la conferència: Química Quàntica: de l'Àtomic i Molecular al Quotidià

Data: 10 de Maig de 2023

Lloc: Sala Darwin

Hora: 12:00 h

Conferenciant: Prof. Dr. Juan Carlos Sancho

Ressenya conferenciant:

Juan Carlos Sancho García és Dr. en CC. Químiques (2001) per la Universitat d'Alacant, desenvolupant la seua labor docent i investigadora com a membre del Grup de Química Quàntica del dept. de Química Física i de l'Institut Universitari de Materials en aqueixa institució. Ha rebut el Premi Extraordinari de Doctorat i el Premi San Alberto Magno d'Investigació en Química. Imparteix docència en la Universitat d'Alacant, al Grau en Química i Grau en Física així com en el Màster en Ciència de Materials i el (nou) Màster en Càlcul i Modelització Científica, majoritàriament en assignatures relacionades amb la química quàntica, l'espectroscòpia molecular i la química computacional.

La seua investigació històricament solapa el desenvolupament de mètodes teòrics (implementats actualment en varietat de programes com GAUSSIAN, ORCA, GAMESS, NWCHEM, etc.) amb les aplicacions a materials orgànics conjugats. En 2013 encapçala un consorci europeu que resulta guanyador del guardó 'Global Research Outreach' per a treballar en col·laboració amb el centre de tecnologies avançades de la multinacional 'Samsung Electronics Co. Ltd.', obrint una nova línia d'investigació per a la interacció matèria-radiació i la seua aplicació en OLEDs d'última generació.

És autor de més de 150 articles en revistes, entre altres, com Chem. Rev., Nat. Chem., Nat. Commun., Acc. Chem. Res., Nano Lett., J. Am. Chem. Soc., J. Phys. Chem. Lett., etc., investigador principal de projectes d'investigació de manera ininterrompuda des de 2004, alhora que avaluador de projectes nacionals i internacionals (ERC inclosos), professor visitant en la Universitats de Llemotges (França), Mons (Bèlgica) i Paris (França), etc. Des de 2020 és Editor de la revista Theor. Chem. Acc., fundada l'any 1962 i pionera en la publicació de resultats d'investigació claus per al continu avanç de la Química Quàntica. Ha participat així mateix en activitats de divulgació en diversos IES i en les 'Nits de Ciència' organitzades per l'Associació per a la Divulgació Científica d'Alacant.

Ressenya /resum de la conferència:

Es creu que la primera aparició de la denominació “Química Quàntica” en la literatura científica es deu a Von Arthur Haas, qui en 1929 va publicar “Die Grundlagen der Quantenchemie” en els anals de la Societat Fisicoquímica d'Àustria. No obstant això, una prova de les dificultats trobades per a situar la nova disciplina, en relació amb altres àrees de la Química plenament consolidades, és la multitud de noms que anava rebent: química matemàtica, química teòrica, mecànica quàntica molecular, teoria quàntica de la valència, química atòmica, etc. Aquests titubejos inicials s'esvaeixen amb els primers ordenadors, afegint-se l'adjectiu “computacional” de manera complementària des de llavors.

En 1967, el químic quàntic suec Per-Olov Löwdin va oferir una de les primeres però alhora més completes definicions de la Química Quàntica, les característiques específiques de la qual eren: (i) l'interés en la determinació de les propietats electròniques d'àtoms, molècules i agregats més complexos; i (ii) la interacció de la teoria, els experiments, la Física i els algorismes computacionals en la construcció del seu cos i metodologia. El seu caràcter contingent i la seua capacitat per a interaccionar amb totes i cadascuna de la resta d'àrees de la Química són, sens dubte, fets rellevants que han afavorit el seu èxit i continu creixement.

Dit això, en quina situació ens trobem hui? Es pot fer qualsevol tipus de càlcul químic-quàntic i per a qualsevol propietat? Per què un càlcul d'aquest tipus pot tardar segons o setmanes? S'utilitza la Química Computacional en el sector privat i en grans empreses? És possible que cotitze en borsa (ni més ni menys que en l'índex NASDAQ) una empresa anomenada Schrödinger? Existeixen fenòmens fisicoquímics encara per descobrir i/o comprovar experimentalment? Com es connecta el món microscòpic i el que ens envolta? És possible dissenyar molècules de manera que algunes regles fonamentals (per exemple, la regla de Hund) no es complisca? Intentarem, a través d'exemples trets de la nostra investigació, il·lustrar el fascinant que continua sent el treball científic i la Ciència en general.

[Públic objectiu:](#)

Públic general.

[Links a materials addicionals si existeixen \(resum, pdf, etc\):](#)

Aquest mateix document.

[ORGANITZADORS:](#)

STVAL – RSEQ – Sección Territorial de Valencia

Facultat de Química

[Altres qüestions rellevants:](#) Conferència recomanada per als estudiants de 3º i 4º curs del Grau de Química de la Universitat de València.

FICHA INFORMATIVA DE CONFERENCIA

CICLO DE CONFERENCIAS: Fronteras de la Química

Título de la conferencia: Química Cuántica: de lo Atómico y Molecular a lo Cotidiano

Fecha: 10 de Mayo de 2023

Lugar: Sala Darwin

Hora: 12:00 h

Conferenciante: Prof. Dr. Juan Carlos Sancho García

Reseña conferenciante:

Juan Carlos Sancho García es Dr. en CC. Químicas (2001) por la Universidad de Alicante, desarrollando su labor docente e investigadora como miembro del Grupo de Química Cuántica del Depto. de Química Física y del Instituto Universitario de Materiales en esa institución. Ha recibido el Premio Extraordinario de Doctorado y el Premio San Alberto Magno de Investigación en Química.

Imparte docencia en la Universidad de Alicante, Grado en Química y Grado en Física así como en el Máster en Ciencia de Materiales y el (nuevo) Máster en Cálculo y Modelización Científica, mayoritariamente en asignaturas relacionadas con la química cuántica, la espectroscopia molecular y la química computacional.

Su investigación históricamente solapa el desarrollo de métodos teóricos (implementados actualmente en variedad de programas como GAUSSIAN, ORCA, GAMESS, NWChem, etc.) con las aplicaciones a materiales orgánicos conjugados. En 2013 encabeza un consorcio europeo que resulta ganador del galardón 'Global Research Outreach' para trabajar en colaboración con el centro de tecnologías avanzadas de la multinacional 'Samsung Electronics Co. Ltd.', abriendo una nueva línea de investigación para la interacción materia-radiación y su aplicación en OLEDs de última generación.

Es autor de más de 150 artículos en revistas, entre otras, como Chem. Rev., Nat. Chem., Nat. Commun., Acc. Chem. Res., Nano Lett., J. Am. Chem. Soc., J. Phys. Chem. Lett., etc., investigador principal de proyectos de investigación de forma ininterrumpida desde 2004, a la vez que evaluador de proyectos nacionales e internacionales (ERC incluidos), profesor visitante en la Universidades de Limoges (Francia), Mons (Bélgica) y Paris (Francia), etc. Desde 2020 es Editor de la revista Theor. Chem. Acc., fundada en el año 1962 y pionera en la publicación de resultados de investigación claves para el continuo avance de la Química Cuántica. Ha participado asimismo en actividades de divulgación en diversos IES y en las 'Noches de Ciencia' organizadas por la Asociación para la Divulgación Científica de Alicante.

Reseña de la conferencia:

Se cree que la primera aparición de la denominación "Química Cuántica" en la literatura científica se debe a Von Arthur Haas, quien en 1929 publicó "Die Grundlagen der Quantenchemie" en los anales de la Sociedad Físico-Química de Austria. Sin embargo, una

prueba de las dificultades encontradas para ubicar la nueva disciplina, en relación con otras áreas de la Química plenamente consolidadas, es la multitud de nombres que iba recibiendo: química matemática, química teórica, mecánica cuántica molecular, teoría cuántica de la valencia, química atómica, etc. Estos titubeos iniciales se desvanecen con los primeros ordenadores, añadiéndose el adjetivo “computacional” de forma complementaria desde entonces.

En 1967, el químico cuántico sueco Per-Olov Löwdin ofreció una de las primeras pero a la vez más completas definiciones de la Química Cuántica, cuyas características específicas eran: (i) el interés en la determinación de las propiedades electrónicas de átomos, moléculas y agregados más complejos; y (ii) la interacción de la teoría, los experimentos, la Física y los algoritmos computacionales en la construcción de su cuerpo y metodología. Su carácter contingente y su capacidad para interactuar con todas y cada una del resto de áreas de la Química son, sin duda, hechos relevantes que han favorecido su éxito y continuo crecimiento.

Dicho esto, ¿en qué situación nos encontramos hoy? ¿Se puede hacer cualquier tipo de cálculo químico-cuántico y para cualquier propiedad? ¿Por qué un cálculo de este tipo puede tardar segundos o semanas? ¿se utiliza la Química Computacional en el sector privado y en grandes empresas? ¿Es posible que cotice en bolsa (nada menos que en el índice NASDAQ) una empresa llamada Schrödinger? ¿Existen fenómenos fisicoquímicos aún por descubrir y/o comprobar experimentalmente? ¿Cómo se conecta el mundo microscópico y aquél que nos rodea? ¿Es posible diseñar moléculas de forma que algunas reglas fundamentales (por ejemplo, la regla de Hund) no se cumpla? Intentaremos, a través de ejemplos sacados de nuestra investigación, ilustrar lo fascinante que sigue siendo el trabajo científico y la Ciencia en general.

Público objetivo: Público general.

Links a materiales adicionales si existen (resumen, pdf, etc) :

Este mismo documento

ORGANIZADO POR:

STVAL – RSEQ – Sección Territorial de Valencia

Facultat de Química

Otros aspectos relevantes: Conferencia recomendada para los estudiantes de 3º y 4º curso del Grado de Química de la Universitat de València.

INFORMATIVE CONFERENCE SHEET

CYCLE OF CONFERENCES: Chemistry Frontiers

Title of the conference: Quantum Chemistry: from Atomic and Molecular to Everyday Life.

Date: 10th May 2023

Place: Darwin Hall

Hour: 12:00 h

Lecturer: Prof. PhD Juan Carlos Sancho

Lecturer information:

Juan Carlos Sancho García is PhD. in Chemistry (2001) by the University of Alicante, developing his teaching and research work as a member of the Quantum Chemistry Group of the Dept. of Physical Chemistry and the University Institute of Materials at that institution. He has received the Extraordinary Doctorate Award and the San Alberto Magno Award for Research in Chemistry. He teaches at the University of Alicante, Degree in Chemistry and Degree in Physics as well as in the Master in Materials Science and the (new) Master in Calculus and Scientific Modeling, mostly in subjects related to quantum chemistry, molecular spectroscopy and computational chemistry.

His research historically overlaps the development of theoretical methods (currently implemented in variety of programs such as GAUSSIAN, ORCA, GAMESS, NWCHEM, etc.) with applications to conjugated organic materials. In 2013 he leads a European consortium that results winner of the 'Global Research Outreach' award to work in collaboration with the advanced technologies center of the multinational 'Samsung Electronics Co. Ltd.', opening a new line of research for matter-radiation interaction and its application in state-of-the-art OLEDs.

He is the author of more than 150 articles in journals, among others, such as Chem. Rev. Chem. Commun. Chem. Res., Nano Lett., J. Am. Chem. Soc., J. Phys. Chem. Lett., etc., principal researcher of research projects uninterruptedly since 2004, as well as evaluator of national and international projects (ERC included), visiting professor at the Universities of Limoges (France), Mons (Belgium) and Paris (France), etc. Since 2020 he is Editor of the journal Theor. Chem. Acc., founded in 1962 and pioneer in the publication of key research results for the continuous advance of Quantum Chemistry. He has also participated in outreach activities in various IES and in the 'Science Nights' organized by the Association for Scientific Dissemination of Alicante.

Summary of the conference:

It is believed that the first appearance of the name "Quantum Chemistry" in the scientific literature is due to Von Arthur Haas, who in 1929 published "Die Grundlagen der

Quantenchemie" in the annals of the Austrian Physical-Chemical Society. However, proof of the difficulties encountered in locating the new discipline, in relation to other fully consolidated areas of chemistry, is the multitude of names it was receiving: mathematical chemistry, theoretical chemistry, molecular quantum mechanics, quantum valence theory, atomic chemistry, etc. These initial hesitations vanished with the first computers, and the adjective "computational" has been added as a complementary adjective ever since.

In 1967, the Swedish quantum chemist Per-Olov Löwdin offered one of the first but at the same time most complete definitions of Quantum Chemistry, whose specific characteristics were: (i) the interest in the determination of the electronic properties of atoms, molecules and more complex aggregates; and (ii) the interaction of theory, experiments, Physics and computational algorithms in the construction of its body and methodology. Its contingent character and its capacity to interact with each and every one of the other areas of Chemistry are, without a doubt, relevant facts that have favored its success and continuous growth.

Having said this, where do we stand today: can any type of chemical-quantum calculation be performed for any property? Why can a calculation of this type take seconds or weeks? Is Computational Chemistry used in the private sector and in large companies? Is it possible that a company called Schrödinger is listed on the stock exchange (on the NASDAQ index, no less!)? Are there physicochemical phenomena yet to be discovered and/or experimentally verified? How is the microscopic world and the world around us connected? Is it possible to design molecules in such a way that some fundamental rules (e.g. Hund's rule) are not fulfilled? We will try, through examples taken from our research, to illustrate how fascinating scientific work and Science in general remains.

[Target audience:](#) General public lecture.

[Links to additional materials if they exist \(summary, pdf, etc.\):](#)

This document.

[ORGANIZERS:](#)

STVAL – RSEQ – Sección Territorial de Valencia

Chemistry Faculty

[Other relevant issues:](#) Lecture recommended for 3rd and 4th year students of the Chemistry Degree of the University of Valencia