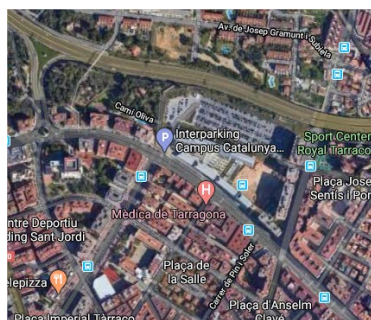


Primavera de Física Quàntica

Aula 425
Edifici A2 4a planta
Universitat Rovira i Virgili
Campus Catalunya
Av. Catalunya, 35
43002 Tarragona



Dimecres 11 de març 18:00

Dr. Albert Bramon

"De les òrbites de Bohr als orbitals de Schrödinger"

Resum:

L'antiga mecànica quàntica de Bohr, insuficient per entendre la física atòmica, va ser substituïda per la definitiva mecànica quàntica actual gràcies a les aportacions de Heisenberg i Schrödinger. El primer va enunciar un principi clau, el d'indeterminació, i l'altre la noció essencialment quàntica d'entrellaçament. La xerrada girarà al voltant d'aquests dos punts.

Albert Bramon ha estat catedràtic de Física Teòrica a diferents universitats, majoritàriament a la Autònoma de Barcelona de la que n'és Professor Emèrit. Ha donat cursos de Mecànica Quàntica a tots nivells i ha publicat una vintena d'articles sobre els fonaments d'aquesta teoria, així com un centenar d'articles més sobre partícules elementals

Dimecres 18 de març 18:00

Dr. Francesc Xavier Giménez

"Química Quàntica: la Física, les Matemàtiques i la Computació, al servei de les molècules i els materials"

Resum:

Imaginem un tros de material. Segur que en podem identificar els àtoms que conté. Només amb aquesta mínima informació ho podem saber pràcticament tot del material. Gràcies als principis de la Física Quàntica, al Càlcul Superior, i a les prestacions dels ordinadors més potents, podem simular com es comporten porcions microscòpiques de matèria, en pràcticament qualsevol circumstància. Podem deformar-la fins al límit, sotmetre-la a radiació intensa, escalfar-la fins a fondre-la, o fins i tot transformar-la químicament. Les proves "in silico" són avui tan acurades, que han esdevingut eines fiables en la recerca química, incloent la vessant industrial. Ho prova la profusió de companyies "start-up" que, des de fa més de dues dècades, contribueixen al desenvolupament tecnològic de sectors com el farmacèutic, el metal·lúrgic, el nanotecnològic o l'electroquímic. La xerrada revisarà el desenvolupament

recent de la Química Quàntica, amb èmfasi en casos d'especial rellevància.

Xavier Giménez és professor titular de la Universitat de Barcelona com a docent, investigador i divulgador científic. És autor d'uns 100 articles de recerca, uns 120 articles de divulgació científica i dels llibres “El Aire que Respiramos” (Edicions UB, Barcelona, 2018) i “Matemáticas y Cambio Climático” (PrisaEdiciones, Madrid, 2019). Ha impartit més de 250 conferències sobre recerca, en trobades internacionals o altres Universitats, en Innovació Docent, i de Divulgació Científica, sobre diversos temes relacionats amb la Química, la Física i el Medi Ambient i ha estat entrevistat en diversos mitjans de comunicació (Premsa, Ràdio i TV), sobre temes d'actualitat en Química. Autor del Blog “Química, Aire y Ambiente”, a la secció Scilogs de “Investigación y Ciencia”. <http://www.investigacionyciencia.es/blogs/fisica-y-quimica/39/posts>

Dimecres 25 de març 18:00

Dr. David Herrera

" Computación Cuántica para Química Ab Initio"

Resum:

Durante esta charla vamos a abordar cómo los nuevos procesadores cuánticos podrían ser útiles al químico computacional en sus cálculos. En primer lugar, expondremos brevemente la razón por la que la computación cuántica ha suscitado interés más allá de los círculos académicos. Seguidamente presentaremos el paradigma NISQ y el porqué de su popularidad reciente. Pasaremos un tiempo explicando cómo ciertos métodos del modelado ab initio pueden ser mejorados si son realizados por un procesador cuántico. Finalmente daremos ejemplos de problemas que podrían beneficiarse de un modelado en procesadores NISQ. Esta charla será de naturaleza divulgativa y no presupone conocimientos de mecánica cuántica o química computacional.

David Herrera obtuvo su doctorado en computación cuántica en Imperial College, Londres, en 2012. Entre 2012 y 2016 ocupó diversos puestos como investigador postdoctoral en el Centro de Tecnología Cuántica de Singapur, la Universidad Hebrea de Jerusalén y en el CNRS de Grenoble. De 2016 a 2018 trabajó como ingeniero RD en *machine learning* e inferencia computacional. Desde 2019 es experto técnico en computación cuántica y *machine learning* en Atos, donde se encarga de evaluar la aplicabilidad de la ventaja cuántica en diferentes dominios. Esto incluye, entre otros, la biotecnología, la energía y la logística.