GUÍA DOCENTE

DENOMINACIÓN DE LA ASIGNATURA

Denominación: **QUÍMICA CUÁNTICA**
Código: 100451
Plan de estudios: **GRADO DE QUÍMICA** Curso: 2
Denominación del módulo al que pertenece: FUNDAMENTAL
Materia: QUÍMICA FÍSICA
Carácter: OBLIGATORIA Duración: PRIMER CUATRIMESTRE
Créditos ECTS: 6.0 Horas de trabajo presencial: 60
Porcentaje de presencialidad: 40.0% Horas de trabajo no presencial: 90
Plataforma virtual: http://moodle.uco.es/moodlemap/

DATOS DEL PROFESORADO

Nombre: CAMACHO DELGADO, LUIS (Coordinador)
Departamento: QUÍMICA FÍSICA Y TERMODINÁMICA APLICADA
Área: QUÍMICA FÍSICA
Ubicación del despacho: Campus de Rabanales- Edificio C3-2ªPlanta
E-Mail: qf1cadel@uco.es Teléfono: 957218617

Nombre: MIGUEL ROJAS, GUSTAVO DE
Departamento: QUÍMICA FÍSICA Y TERMODINÁMICA APLICADA
Área: QUÍMICA FÍSICA
Ubicación del despacho: Campus de Rabanales- Edificio C3-2ªPlanta
E-Mail: q62mirog@uco.es Teléfono: 957212423

REQUISITOS Y RECOMENDACIONES

Requisitos previos establecidos en el plan de estudios

Ninguno

Recomendaciones

Es conveniente haber adquirido conocimientos suficientes en las materias de Matemáticas Generales, Física I y II y Estructura Atómica y Enlace Químico de primer curso.

GUÍA DOCENTE

COMPETENCIAS

CB5	Capacidad para la gestión de datos y la generación de información / conocimiento.
CE6	Principios de mecánica cuántica y su aplicación en la descripción de la estructura y propiedades de átomos y moléculas.
CE21	Capacidad para demostrar el conocimiento y comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química.
CE22	Capacidad de aplicar dichos conocimientos a la resolución de problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados.
CE23	Competencia para evaluar, interpretar y sintetizar datos e información Química.
CE24	Capacidad para reconocer y llevar a cabo buenas prácticas en el trabajo científico.
CE26	Destreza en el manejo y procesado informático de datos e información química.
CE31	Interpretación de datos procedentes de observaciones y medidas en el laboratorio en términos de su significación y de las teorías que la sustentan.
CU2	Conocer y perfeccionar el nivel de usuario en el ámbito de las TIC.

OBJETIVOS

Conocer los principios de la Química Cuántica y su aplicación a la descripción de las propiedades de los átomos, las moléculas y los sólidos. Asimismo, se analizarán los tipos de interacciones entre moléculas.

CONTENIDOS

1. Contenidos teóricos

Lección 1. INTRODUCCIÓN Y POSTULADOS DE LA MECÁNICA CUÁNTICA

Orígenes de la Mecánica Cuántica. Postulados de la mecánica cuántica. Consecuencias de los postulados. La determinación simultánea de observables: El principio de incertidumbre.

LECCIÓN 2. APLICACIÓN DE LA MECÁNICA CUÁNTICA A SISTEMAS SENCILLOS.

Movimiento de traslación: Partícula en una caja de potenciales de paredes infinitas. El efecto túnel. Movimiento de vibración: Oscilador armónico. Osciladores acoplados: Energía de London. Absorción de radiación electromagnética.

LECCIÓN 3: MOMENTO ANGULAR Y MOVIMIENTO DE ROTACIÓN.

Operador momento angular y relaciones de conmutación. El conjunto completo de funciones propias de los operadores L2 y Lz. El rotor rígido.

LECCIÓN 4: EL ÁTOMO DE HIDRÓGENO.

Soluciones de la ecuación de Schrödinger para el átomo de Hidrógeno. Unidades atómicas. Reglas de selección espectroscópicas. El spin electrónico. Momento angular total y efecto Zeeman.

LECCIÓN 5. MÉTODOS APROXIMADOS Y PRINCIPIO DE EXCLUSIÓN DE PAULI.

La ecuación de Schrödinger para átomos polielectrónicos. Aproximación de electrones independientes. Método de variaciones. Cálculo de constantes de apantallamiento mediante el método de variaciones. Método de perturbaciones. Método del campo autoconsistente de Hartree. Funciones de onda simétricas y antisimétricas. Principio de exclusión de Pauli.

LECCIÓN 6: ÁTOMOS POLIELECTRÓNICOS.

El átomo de He. Determinantes de Slater. Orbitales aproximados de Slater. Principio de Construcción y Configuración electrónica. Momento angular en átomos polielectrónicos. Interacciones spin-orbital. Estructura energética y espectros de átomos polielectrónicos.

LECCIÓN 7. TEORÍA DE ORBITALES MOLECULARES.

Aproximación de Born-Oppenheimer. Teoría de Orbitales Moleculares. La molécula ión de hidrógeno, H2+.

GUÍA DOCENTE

Interpretación física de los orbitales moleculares. Estados electrónicos de la molécula H2+.

LECCIÓN 8. MOLÉCULAS DIATÓMICAS.

Diagramas de correlación y configuración electrónica de moléculas diatómicas homonucleares. Términos espectroscópicos moleculares. Estados electrónicos de moléculas diatómicas homonucleares. Moléculas diatómicas heteronucleares. La teoría de Enlace-Valencia.

LECCIÓN 9: MOLÉCULAS POLIATÓMICAS SENCILLAS.

Orbitales moleculares localizados: aproximación de la valencia dirigida. Otros métodos semi-empíricos: Hibridación. La Molécula de agua según la teoría de orbitales moleculares. Diagramas de Walsh. El método del campo auto-consistente de Hartree-Fock aplicado a moléculas.

LECCIÓN 10: INTRODUCCIÓN A LA TEORÍA DE GRUPOS DE SIMETRÍA.

Operaciones y elementos de simetría. Clasificación de las moléculas según su simetría. Tabla de caracteres y simetría molecular. Representaciones irreductibles. Orbitales simétricamente adaptados. Simetría y degeneración.

LECCIÓN 11: MOLÉCULAS POLIATÓMICAS COMPLEJAS.

Introducción. El método de Hückel para sistemas conjugados. Moléculas con heteroátomos. Índices de reactividad y aplicaciones del método de Hückel. Aplicaciones de la teoría de Hückel a otros sistemas con deslocalización electrónica: Teoría del campo de Ligandos y Teoría de bandas de sólidos.

2. Contenidos prácticos

Introducción al manejo de software de Química Computacional. Obtención de parámetros moleculares. El método de Hartree-Fock aplicado a moléculas. Diagramas de orbitales moleculares. Curvas de potencial. Relación entre geometría molecular y configuración electrónica: Diagramas de Walsh. Optimización de estructura molecular.

METODOLOGÍA

Aclaraciones generales sobre la metodología (opcional)

La asistencia a las prácticas de laboratorio y seminarios es obligatoria. En los seminarios se resolverán cuestiones y problemas relacionadas con el programa teórico.

Los alumnos repetidores estarán exentos de asistir a los laboratorios de informática, siempre que hayan asistido en cursos anteriores. Los seminarios seguirán siendo obligatorios para estos alumnos.

Adaptaciones metodológicas para alumnado a tiempo parcial y estudiantes con discapacidad y necesidades educativas especiales

Las adaptaciones de la metodología didáctica para los estudiantes a tiempo parcial, estudiantes con discapacidad y necesidades educativas especiales, se especificarán una vez conocida la causistica de este colectivo.

Actividades presenciales

Actividad	Grupo completo	Grupo mediano	Grupo pequeño	Total
Actividades de evaluación	5	-	-	5
Laboratorio	-	-	6	6
Lección magistral	28	-	-	28
Seminario	-	21	-	21
Total horas:	***33***	***21***	***6***	***60***

GUÍA DOCENTE

Actividades no presenciales

Actividad	Total
Ejercicios	20
Estudio	70
Total horas:	***90***

MATERIAL DE TRABAJO PARA EL ALUMNO

Cuaderno de Prácticas - *http://moodle.uco.es/moodlemap/*
Ejercicios y problemas - *http://moodle.uco.es/moodlemap/*
Manual de la asignatura - *http://moodle.uco.es/moodlemap/*

EVALUACIÓN

Competencias	Exámenes	Pruebas de ejecución de tareas reales y/o simuladas	Supuesto práctico/discusión caso clínico/discusión trabajo científico
CB5	X	X	
CE21	X	X	
CE22	X	X	
CE23	X	X	
CE24			X
CE26			X
CE31	X	X	
CE6	X	X	
CU2	X		
Total (100%)	***80%***	***10%***	***10%***
Nota mínima (*)	***4***	***0***	***0***

(*)Nota mínima para aprobar la asignatura

GUÍA DOCENTE

Método de valoración de la asistencia:

La asistencia es obligatoria, no admitiéndose faltas no justificadas.

Aclaraciones generales sobre los instrumentos de evaluación:

La asistancia a las practicas es obligatoria, no admitiéndose faltas no justificadas.
El examen final representa el 80% de la nota final, 40% teoría y 40% resolución de problemas, si bien, además del examen final, se realizará un examen parcial eliminatorio correspondiente a las lecciones 1-6.
Los Informes/memorias de prácticas conllevan la resolución de un problema de estructura molecular. Este apartado representa el 10% de la nota final.
Las pruebas de respuesta corta representan el 10% de la nota final.
En cualquier caso, es necesario obtener una calificación igual o mayor que 4.0 en el examen final para poder aprobar la asignatura.

Aclaraciones sobre la evaluación para el alumnado a tiempo parcial y necesidades educativas especiales:

Las adaptaciones de la evaluación para los estudiantes a tiempo parcial y necesidades educativas especiales, se especificarán una vez conocida la causistica de este colectivo.
Los alumnos repetidores que superaron en cursos anteriores la resolución de un problema de estructura molecular, no necesitarán repetir esta actividad, conservándose la calificación obtenida. Este apartado representa el 10% de la nota final.
Las pruebas de respuesta corta son obligatorias también para los alumnos repetidores. Este apartado representa el 10% de la nota final.

Criterios de calificación para la obtención de Matrícula de Honor:

Nota media igual o superior a 9. El número de MH dependerá del número de alumnos matriculados, de acuerdo con la normativa de la UCO

BIBLIOGRAFIA

1. Bibliografía básica

Química Física. Atkins y de Paula. Ed. Panamericana, 2008. 8ª Edición
Química Física. Thomas Engel y Philip Reid. Ed. Pearson Addison Wesley. 2006.
Fisicoquímica (2 volumines). Levine. I. N. Ed. Mc Graw-Hill. 2004, 5ª Edición
Qumica Física . J. Bertrán, J. Núñez, Ed. Ariel Ciencia, 2002
Fisicoquímica. K.J. Laidler, J.H. Meiser. Ed. CECSA, 1998
Química Física. A.W. Adamson. Ed. Reverte, 1999.

2. Bibliografía complementaria

Physical Chemistry. Berry/Rice/Ross. Ed. Wiley 1980
Química Cuántica. Beltrán, J.; Branchedell, V.; Moreno, M.; Sodupe, M. Ed. Síntesis. 2000
Química Cuántica. Levine. I. N. Ed. Prentice Hall. 2001, 5ª Edición.
Elementary Quantum Chemistry.Pilar. Ed. Dover,. 1990, 2ª Edición.
Molecular Quantum Mechanics, Atkins, P.W. y Friedman, R. S., Ed. Oxford, 1997, 3ª Edición
Física: Fundamentos Cuánticos y Estadísticos. Alonso y Finn. Ed. Fondo Educativo Iber. 1976

GUÍA DOCENTE

CRITERIOS DE COORDINACIÓN

Fecha de entrega de trabajos
Realización de actividades

CRONOGRAMA

Periodo	Actividades de evaluación	Laboratorio	Lección magistral	Seminario
1ª Quincena	0,0	0,0	4,0	0,0
2ª Quincena	0,0	0,0	4,0	6,0
3ª Quincena	0,0	0,0	4,0	3,0
4ª Quincena	0,0	0,0	4,0	3,0
5ª Quincena	0,0	3,0	4,0	0,0
6ª Quincena	2,0	0,0	2,0	6,0
7ª Quincena	0,0	0,0	4,0	3,0
8ª Quincena	3,0	3,0	2,0	0,0
Total horas:	***5,0***	***6,0***	***28,0***	***21,0***

Las estrategias metodológicas y el sistema de evaluación contempladas en esta Guía Docente serán adaptadas de acuerdo a las necesidades presentadas por estudiantes con discapacidad y necesidades educativas especiales en los casos que se requieran.

PLAN DE CONTINGENCIA: ESCENARIO A

El escenario A, se corresponde con una menor actividad académica presencial en el aula como consecuencia de medidas sanitarias de distanciamiento interpersonal que limite el aforo permitido en las aulas.

METODOLOGÍA

Aclaraciones generales sobre la metodología en el escenario A

Se adoptará un sistema multimodal o híbrido de enseñanza que combine, en todo lo posible, las clases presenciales en aula y las clases presenciales por videoconferencia (sesiones síncronas) que se impartirán en el horario aprobado por el Centro. La distribución temporal de las actividades que se llevarán a cabo de forma presencial en aula y presencial por videoconferencia estará determinado por el Centro en función del aforo permitido en los espacios docentes y las medidas sanitarias de distanciamiento interpersonal que estén vigentes en cada momento.

La asistencia a las prácticas de laboratorio y seminarios es obligatoria. En los seminarios se resolverán cuestiones y problemas relacionadas con el programa teórico.

Los alumnos repetidores estarán exentos de asistir a los laboratorios de informática, siempre que hayan asistido en cursos anteriores. Los seminarios seguirán siendo obligatorios para estos alumnos.

GUÍA DOCENTE

EVALUACIÓN

Competencias	Exámenes	Pruebas de ejecución de tareas reales y/o simuladas	Resolución de problemas	Supuesto práctico/discusión caso clínico/discusión trabajo científico
CB5	X	X	X	
CE21	X	X	X	
CE22	X	X	X	
CE23	X	X	X	
CE24				X
CE26				X
CE31	X	X	X	
CE6	X	X	X	
CU2	X			
Total (100%)	***60%***	***10%***	***20%***	***10%***
Nota mínima (*)	***4***	***0***	***4***	***0***

(*)Nota mínima para aprobar la asignatura

Método de valoración de la asistencia (Escenario A):

La asistencia es obligatoria, no admitiéndose faltas no justificadas.

Aclaraciones generales sobre los instrumentos de evaluación (Escenario A):

La asistancia a las practicas es obligatoria, no admitiéndose faltas no justificadas.

El examen final representa el 60% de la nota final, si bien, además del examen final, se realizará un examen parcial eliminatorio correspondiente a las lecciones 1-6.

Los Informes/memorias de prácticas conllevan la resolución de un problema de estructura molecular. Este apartado representa el 10% de la nota final.

Las pruebas de respuesta corta representan el 10% de la nota final.

La resolución de problemas (20% de la nota final) se planteará a los alumnos de forma individualizada, en un proceso de evaluación continua. La resolución de problemas es obligatoria para todos los alumnos, incluidos repetidores.

En cualquier caso, es necesario obtener una calificación igual o mayor que 4.0 en el examen final, así como en la resolución de problames, para poder aprobar la asignatura.

En relación a los instrumentos de evaluación y ponderación de la convocatoria extraordinaria del curso 2020-2021 para los estudiantes de segunda matrícula o superior, los criterios de evaluación, bajo la condición de haber realizado en cualquier convocatoria previa la resolución del problema de estructura molecular y las pruebas de

GUÍA DOCENTE

respuesta corta, que entre ambas representan el 20% de la nota final, serían:
- La resolución de problemas (20% de la nota final)
- El examen final (60% de la nota final)

Aclaraciones sobre la evaluación para el alumnado a tiempo parcial y necesidades educativas especiales (Escenario A):

Las adaptaciones de la evaluación para los estudiantes a tiempo parcial y necesidades educativas especiales, se especificarán una vez conocida la causistica de este colectivo.

Criterios de calificación para la obtención de Matrícula de Honor (Escenario A):

Nota media igual o superior a 9. El número de MH dependerá del número de alumnos matriculados, de acuerdo con la normativa de la UCO

PLAN DE CONTINGENCIA: ESCENARIO B

El escenario B, contempla la suspensión de la actividad presencial en el aula como consecuencia de medidas sanitarias.

METODOLOGÍA

Aclaraciones generales sobre la metodología en el escenario B

La actividad docente presencial se llevará a cabo por videoconferencia (sesiones síncronas) en el horario aprobado por el Centro. Se propondrán actividades alternativas para los grupos reducidos que garanticen la adquisición de las competencias de esa asignatura.

La asistencia a las prácticas de laboratorio y seminarios es obligatoria. En los seminarios se resolverán cuestiones y problemas relacionadas con el programa teórico.

Los alumnos repetidores estarán exentos de asistir a los laboratorios de informática, siempre que hayan asistido en cursos anteriores. Los seminarios seguirán siendo obligatorios para estos alumnos.

GUÍA DOCENTE

EVALUACIÓN

Competencias	Exámenes	Pruebas de ejecución de tareas reales y/o simuladas	Resolución de problemas	Supuesto práctico/discusión caso clínico/discusión trabajo científico
CB5	X	X	X	
CE21	X	X	X	
CE22	X	X	X	
CE23	X	X	X	
CE24				X
CE26				X
CE31	X	X	X	
CE6	X	X	X	
CU2	X			
Total (100%)	***60%***	***10%***	***20%***	***10%***
Nota mínima (*)	***4***	***0***	***4***	***0***

(*)Nota mínima para aprobar la asignatura

Herramientas Moodle	Exámenes	Pruebas de ejecución de tareas reales y/o simuladas	Resolución de problemas	Supuesto práctico/discusión caso clínico/discusión trabajo científico
Asistencia	X			
Foro		X	X	X
Tarea		X	X	X

Método de valoración de la asistencia (Escenario B):

La asistencia es obligatoria, no admitiéndose faltas no justificadas.

Aclaraciones generales sobre los instrumentos de evaluación (Escenario B):

La asistancia a las practicas es obligatoria, no admitiéndose faltas no justificadas.

El examen final representa el 60% de la nota final, si bien, además del examen final, se realizará un examen parcial eliminatorio correspondiente a las lecciones 1-6.

Los Informes/memorias de prácticas conllevan la resolución de un problema de estructura molecular. Este apartado representa el 10% de la nota final.

Las pruebas de respuesta corta representan el 10% de la nota final.

GUÍA DOCENTE

La resolución de problemas (20% de la nota final) se planteará a los alumnos de forma individualizada, en un proceso de evaluación continua. La resolución de problemas es obligatoria para todos los alumnos, incluidos repetidores.

En cualquier caso, es necesario obtener una calificación igual o mayor que 4.0 en el examen final, así como en la resolución de problames, para poder aprobar la asignatura.

En relación a los instrumentos de evaluación y ponderación de la convocatoria extraordinaria del curso 2020-2021 para los estudiantes de segunda matrícula o superior, los criterios de evaluación, bajo la condición de haber realizado en cualquier convocatoria previa la resolución del problema de estructura molecular y las pruebas de respuesta corta, que entre ambas representan el 20% de la nota final, serían:

- La resolución de problemas (20% de la nota final)
- El examen final (60% de la nota final)

Aclaraciones sobre la evaluación para el alumnado a tiempo parcial y necesidades educativas especiales (Escenario B):

Las adaptaciones de la evaluación para los estudiantes a tiempo parcial y necesidades educativas especiales, se especificarán una vez conocida la causistica de este colectivo.

Criterios de calificación para la obtención de Matrícula de Honor (Escenario B):

Nota media igual o superior a 9. El número de MH dependerá del número de alumnos matriculados, de acuerdo con la normativa de la UCO