

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
URL web:	http://moodle.uco.es/moodlemap/	

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.

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.

GUÍA DOCENTE

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. así como 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 L^2 y L_z . 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 polieletrónicos. 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 polieletrónicos. Interacciones spin-orbital. Estructura energética y espectros de átomos polieletrónicos.

LECCIÓN 7. TEORÍA DE ORBITALES MOLECULARES.

Aproximación de Born-Oppenheimer. Teoría de Orbitales Moleculares. La molécula ión de hidrógeno, H_2^+ . Interpretación física de los orbitales moleculares. Estados electrónicos de la molécula H_2^+ .

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 irreducibles. 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.

GUÍA DOCENTE

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.

OBJETIVOS DE DESARROLLO SOSTENIBLE RELACIONADOS CON LOS CONTENIDOS

Educación de calidad

METODOLOGÍA

Aclaraciones generales sobre la metodología (opcional)

La asistencia a las prácticas de laboratorio de informática 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 causística de este colectivo.

Actividades presenciales

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

Actividades no presenciales

Actividad	Total
<i>Ejercicios</i>	20
<i>Estudio</i>	70
Total horas:	90

GUÍA DOCENTE**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/>
 Presentaciones PowerPoint
 Resúmenes de los temas

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 (sobre 10) necesaria para que el método de evaluación sea considerado en la calificación final de la asignatura. En todo caso, la calificación final para aprobar la asignatura debe ser igual o superior a 5,0.

GUÍA DOCENTE

Método de valoración de la asistencia:

La asistencia es obligatoria, no admitiéndose faltas no justificadas.

Aclaraciones generales sobre los instrumentos de evaluación:

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. La validez de la calificación obtenida en dicho examen parcial solo afecta a la convocatoria ordinaria, o a la extraordinaria, si el alumno no utilizo la convocatoria ordinaria del examen.

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, siendo obligatoria la asistencia a clase, salvo ausencia justificada, para poder contestar a estas cuestiones.

En cualquier caso, es necesario obtener una calificación igual o mayor que 4.0 en el examen final para poder aprobar la asignatura. De no superar la calificación de 4.0 en el examen final, la calificación final de la asignatura será la que se obtenga en dicho examen final.

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.

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 causística de este colectivo.

Aclaraciones sobre la evaluación de la convocatoria extraordinaria y convocatoria extraordinaria de finalización de estudios:

La evaluación se realizará en base a un único examen, en el que se plantearán cuestiones que abarquen conocimientos relacionados con todas las competencias, incluyendo las relacionadas con supuestos prácticos.

En función de cada caso, se aplicaran los mismos criterios que los aplicados durante la última convocatoria ordinaria cursada por el alumno, manteniendo los porcentajes de cada criterio de evaluación. Es decir, el 80% de la nota final (40% teoría y 40% resolución de problemas) corresponderan a las preguntas específicas que se indiquen en el examen. Los alumnos repetidores que superaron en cursos anteriores la resolución de un problema de estructura molecular (10% de la nota), así como las respuestas a cuestiones cortas (10% de la nota), se les conservará la calificación obtenida. De no ser el caso, se dará opción a los alumnos a superar los diferentes elementos de evaluación, con sus correspondientes porcentajes.

GUÍA DOCENTE

Crterios de calificación para la obtención de Matrícula de Honor:

Según el artículo 80.3 del Reglamento de Régimen Académico de la Universidad de Córdoba la mención de "Matrícula de Honor" podrá ser otorgada al estudiantado que haya obtenido una calificación igual o superior a 9.0.

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.
 Físicoquímica (2 volúmenes). Levine. I. N. Ed. Mc Graw-Hill. 2004, 5ª Edición.
 Química Física. J. Bertrán, J. Núñez, Ed. Ariel Ciencia, 2002.
 Físicoquímica. 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.

CRITERIOS DE COORDINACIÓN

- Fecha de entrega de trabajos
 Realización de actividades

CRONOGRAMA

Periodo	Actividades de evaluación	Laboratorio	Lección magistral	Seminario
1ª Semana	0,0	0,0	2,0	0,0
2ª Semana	0,0	0,0	2,0	0,0
3ª Semana	0,0	0,0	2,0	3,0
4ª Semana	0,0	0,0	2,0	0,0
5ª Semana	0,0	0,0	2,0	3,0
6ª Semana	0,0	0,0	2,0	3,0
7ª Semana	2,0	0,0	2,0	0,0

GUÍA DOCENTE

Periodo	Actividades de evaluación	Laboratorio	Lección magistral	Seminario
8ª Semana	0,0	0,0	2,0	3,0
9ª Semana	0,0	3,0	2,0	0,0
10ª Semana	0,0	0,0	2,0	3,0
11ª Semana	0,0	0,0	2,0	0,0
12ª Semana	0,0	3,0	2,0	0,0
13ª Semana	0,0	0,0	2,0	3,0
14ª Semana	3,0	0,0	2,0	3,0
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.