

DATOS DE LA ASIGNATURA					
Asignatura:	Química Cuántica y Espectroscopía			Código:	757509213
Módulo:	Fundamental			Materia:	Química Física
Carácter:	Obligatoria	Curso:	3	Cuatrimestre:	2º
Créditos ECTS	9	Teóricos:	7	Prácticos:	2
Departamento/s:	Ingeniería Química, Química Física y Química Orgánica		Área/s de Conocimiento:	Química Física	

PROFESOR/A		E-mail	Ubicación	Teléfono
Coord.:	Manuel López López	manuel.lopez@diq.uhu.es	F.CC.Exp. 6308	959 21 8206
Prof 2:	Juan Daniel Mozo Llamazares	jdaniel.mozo@diq.uhu.es	F.CC.Exp. 6304	959 21 9992
Prof 3:				
Horario Tutorías	Prof. 1	Jueves y viernes de 12 a 14		
	Prof. 2	Jueves y viernes de 12 a 14		
	Prof. 3			
Campus Virtual	<input checked="" type="checkbox"/> Moodle <input type="checkbox"/> Página web:			

Contexto de la asignatura	<p><u>Encuadre en el Plan de Estudios</u></p> <p>La asignatura se imparte en el 2º cuatrimestre del 3º curso. Pretende profundizar en la visión microscópica de la materia, después de que ya los alumnos hayan estudiado, en el segundo curso de esta titulación, la materia desde un punto de vista macroscópico. Esta asignatura servirá de base para otras asignaturas de cursos superiores en las que se ampliarán los contenidos que se pretende que los alumnos asimilen en esta asignatura.</p> <p><u>Repercusión en el perfil profesional</u></p> <p>Los conocimientos que se adquieren en esta asignatura proporcionan al estudiante una base sólida para comprender el fundamento atómico y molecular de los procesos químicos y sus aplicaciones a la espectroscopia.</p>
Objetivo General de la Asignatura:	<p>Teniendo en cuenta el número de horas que marca el Plan de Estudio para esta asignatura, los contenidos han sido seleccionados de forma que permitan una comprensión rápida por parte del alumno de los conocimientos básicos que precisará utilizar posteriormente.</p> <p>Los principales objetivos de esta asignatura son:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Entender y comprender los Fundamentos de la Mecánica Cuántica y los métodos teóricos de estudio de las estructuras atómica y molecular. -Adquirir destreza en la resolución de problemas relacionados con la gran variedad de aplicaciones de la Mecánica Cuántica a la Química y en la utilización de programas informáticos de Química Cuántica. -Estudiar y comprender la descripción de modelos teóricos de cálculo de orbitales moleculares y su relación con datos experimentales. - Aplicar estos conocimientos a los datos espectroscópicos y su interpretación.

<p>Competencias básicas o transversales</p>	<p>Capacidad de análisis y síntesis Comunicación oral y escrita en la lengua nativa Resolución de problemas Capacidad de adaptarse a nuevas situaciones y toma de decisiones Razonamiento crítico Capacidad de aprendizaje autónomo para el desarrollo continuo profesional.</p>
<p>Competencias específicas</p>	<p>Conocer las técnicas principales de investigación estructural, incluyendo espectroscopia</p> <p>Conocer los principios de mecánica cuántica y su aplicación en la descripción de la estructura y propiedades de átomos y moléculas.</p> <p>Conocer la relación entre propiedades macroscópicas y propiedades de átomos y moléculas individuales: incluyendo macromoléculas (naturales y sintéticas), polímeros, coloides y otros materiales.</p> <p>Capacidad para demostrar el conocimiento y comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química.</p> <p>Capacidad de aplicar dichos conocimientos a la resolución de problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados.</p> <p>Competencia para presentar, tanto en forma escrita como oral, material y argumentación científica a una audiencia especializada.</p> <p>Destreza en el manejo y procesado informático de datos e información química.</p>
<p>Recomendaciones</p>	<p>Haber adquirido unos conocimientos básicos en las asignaturas de los cursos 1º y 2º relacionadas con la Química Cuántica, especialmente en las propias de química así como en las de Física y Matemáticas</p>
<p>BLOQUES TEMÁTICOS</p>	<p>1. FUNDAMENTOS DE LA MECÁNICA CUÁNTICA (Temas 1-2) 2. ESTRUCTURA ATÓMICA Y ESPECTROSCOPÍA (Temas 3-5) 3. SISTEMAS MOLECULARES Y ESPECTROSCOPÍA (Temas 6-10)</p>
<p>Temario Teórico y Planificación Temporal:</p>	<p>Tema 1. - Fundamentos de la mecánica cuántica (2 semanas) Tema 2. - Traslación, vibración y rotación en mecánica cuántica (1 semanas) Tema 3. - El átomo de hidrógeno (1.5 semanas) Tema 4. - Métodos aproximados en mecánica cuántica (1 semanas) Tema 5. - Átomos polieletrónicos y espectroscopia atómica (1.5 semanas) Tema 6. - Sistemas moleculares y espectroscopías. (2 sem) Tema 7. - Espectroscopia de microondas y Raman rotacional. (1.5 sem) Tema 8. - Espectroscopia de infrarrojo y Raman vibracional. (1.5 sem) Tema 9. - Espectroscopia electrónica molecular. (1.5 sem) Tema 10.- Espectroscopia de resonancia. (1.5 sem)</p>
<p>Temario Práctico y Planificación Temporal:</p>	<p>- Cálculos mecano cuánticos (5 sesiones de 4 horas).</p>

<p>Actividades Dirigidas y Planificación Temporal</p>	<p>D1. Resolución de problemas por grupos. Se organizarán grupos de trabajo donde los compañeros se prestarán ayuda a la hora de superar las dificultades que se encuentren en la resolución de cuestiones teórica y problemas. Se generarán cuadernillos de cuestiones teórica y problemas que se pasarán a otros Grupos de Trabajo. Así, se animará al estudiante a alcanzar los siguientes objetivos: entender y asimilar los conceptos básicos, pasar con facilidad de la teoría a la práctica, trabajar en grupo y ser competitivos.</p> <p>D2. Resolución de Cuestiones Teóricas y Problemas extraídos de la Bibliografía: de los manuales disponibles en la Biblioteca, el estudiante extraerá aquellos problemas que le resulten interesantes, los resolverá y expondrá en clase.</p> <p>D3. Elaboración del cuaderno de prácticas. Se organizarán grupos de trabajo donde los compañeros se prestarán ayuda a la hora de elaborar el cuaderno de las diferentes prácticas que los alumnos deben de realizar. Esto conllevará la realización de cálculos cuánticos y su comparación datos experimentales cuando así proceda.</p>				
<p>Metodología Docente Empleada:</p>	<p>1. Impartición de clases teóricas. Los recursos utilizados son la pizarra, proyector de transparencias, proyecciones con ordenador y fotocopias de apoyo con figuras, esquemas y tablas. Las clases se desarrollan de manera interactiva con los alumnos, discutiendo con ellos los aspectos que resultan más difíciles o especialmente interesantes de cada tema.</p> <p>2. Impartición de clases de problemas. Se resuelven problemas tipo, haciendo hincapié en la comprensión del mecanismo de resolución y resaltando la relación de los problemas con aplicaciones prácticas.</p> <p>3. Realización de sesiones Prácticas. Cada tema experimental es introducido mediante un guión. A partir del estudio/repaso de los aspectos teóricos del experimento el alumno debe plantear antes de su realización todas las cuestiones relativas al mismo tanto desde el punto de vista de los conocimientos teóricos previos, como a una descripción pormenorizada del trabajo a realizar y método para la obtención y análisis de los resultados. Posteriormente se proponen para su resolución algunas cuestiones adicionales relacionadas con el experimento en concreto. Realización del trabajo práctico por parte del alumno con un estrecho seguimiento del profesor de la asignatura. Y, por último, el análisis de los resultados obtenidos.</p> <p>4. Realización de actividades académicas dirigidas. Trabajo tutorizado con grupos reducidos donde el profesor/a orienta a los estudiantes para la realización de actividades que les ayuden a reforzar y asimilar los contenidos de la asignatura. Se asignará a cada grupo una serie de actividades de entre las relacionadas en la presente Guía.</p>				
<p>Criterios de Evaluación:</p>	<p>La calificación final de la asignatura se obtendrá con los siguientes sumandos:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. El 50% de la calificación de la asignatura corresponderá a un examen final. Dicho examen constará de cuestiones teórica, teórico-prácticas y problemas. Para la superación de la asignatura se requerirá la obtención de una calificación superior a 4 puntos (sobre 10) en el examen final. 2. El 20% de la calificación por la realización y/o exposición de trabajos realizados (bibliográficos, problemas, cuestiones), individualmente o en equipo y otras actividades académicas dirigidas. 3. Y el 30% restante por la realización de las prácticas y la presentación del informe científico de las mismas de manera individual. 				
<p>Distribución Horas Presenciales</p>	<p>Grupo Grande</p> <p>33</p>	<p>Grupo Pequeño</p> <p>19</p>	<p>Laboratorio</p> <p>--</p>	<p>Lab. Informática</p> <p>20</p>	<p>Campo</p> <p>--</p>

Bibliografía:

- **Bertrán Rusca, J.; Branchadell Gallo, V.; Moreno Ferrer, M.; Sodupe Roure, M.;** *Química Cuántica, Síntesis*, 2002.
- **Levine, I.N.,** *Química Cuántica*, Prentice Hall, 2001.
- **Atkins, P.W.; Friedman, R.S.;** *Molecular Quantum Mechanics 4th ed.*, Oxford University Press, 2005.
- **Levine, I.N.** *Fisicoquímica*, 5a ed., vols. 1 y 2, McGraw-Hill Interamericana de España, S.A, 2004
- **Bertrán Rusca, J.; Núñez Delgado, J. (coords.)**, *Química Física vols. 1 y 2*, Ariel Ciencia, 2002.
- **Requena, A. y Zúñiga, J.:** *Espectroscopía*, Pearson-Prentice Hall, Madrid, 2003.
- **Requena, A. y Zúñiga, J.:** *Química Física. Problemas de Espectroscopia. Fundamentos, átomos y moléculas diatómicas*, Pearson-Prentice Hall, Madrid, 2007.
- **Banwell, C. N.:** *Fundamentos de Espectroscopía Molecular*, Ed. del Castillo, Madrid, 1977.