

## GRADO EN QUÍMICA

### DATOS DE LA ASIGNATURA

ASIGNATURA	QUÍMICA CUÁNTICA Y ESPECTROSCOPIA	SUBJECT	QUANTUM CHEMISTRY AND SPECTROSCOPY
CÓDIGO	757509213		
MÓDULO	FUNDAMENTAL	MATERIA	Q. FÍSICA
CURSO	3 <sup>º</sup>	CUATRIMESTRE	2 <sup>º</sup>
DEPARTAMENTO	INGENIERÍA QUÍMICA, QUÍMICA FÍSICA Y CIENCIAS DE LOS MATERIALES	ÁREA DE CONOCIMIENTO	QUÍMICA FÍSICA
CARÁCTER	OBLIGATORIA	CAMPUS VIRTUAL	MOODLE

### DISTRIBUCIÓN DE CRÉDITOS

	TOTAL	TEÓRICOS GRUPO GRANDE	TEÓRICOS GRUPO REDUCIDO	PRÁCTICAS DE INFORMÁTICA	PRÁCTICAS DE LABORATORIO	PRÁCTICAS DE CAMPO
ECTS	9	7	0	0	2	0

### DATOS DEL PROFESORADO

#### COORDINADOR

NOMBRE	MANUEL LÓPEZ LÓPEZ		
DEPARTAMENTO	INGENIERÍA QUÍMICA, QUÍMICA FÍSICA Y CIENCIAS DE LOS MATERIALES		
ÁREA DE CONOCIMIENTO	QUÍMICA FÍSICA		
UBICACIÓN	FEXP P3-N6-15		
CORREO ELECTRÓNICO	manuel.lopez@diq.uhu.es	TELÉFONO	959218206
URL WEB		CAMPUS VIRTUAL	MOODLE

#### OTROS DOCENTES

NOMBRE	JOSÉ JOAQUÍN MARAVER PUIG		
DEPARTAMENTO	INGENIERÍA QUÍMICA, QUÍMICA FÍSICA Y CIENCIAS DE LOS MATERIALES		
ÁREA DE CONOCIMIENTO	QUÍMICA FÍSICA		
UBICACIÓN	P.3-N.6-13		
CORREO ELECTRÓNICO	maraver@uhu.es	TELÉFONO	959218200
URL WEB		CAMPUS VIRTUAL	MOODLE

### DESCRIPCIÓN GENERAL DE LA ASIGNATURA

#### DESCRIPCIÓN GENERAL

La asignatura se imparte en el 2º semestre 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.

### ABSTRACT

The subject is taught in the 2nd semester of the 3rd year. It seeks to deepen the microscopic view of matter, after the students have already studied, in the second course of this degree, the matter from a macroscopic point of view. This subject will serve as a basis for other subjects of higher courses in which the contents studied here will be expanded.

### OBJETIVOS: RESULTADOS DEL APRENDIZAJE

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.

Los principales objetivos de esta asignatura son:

- 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.

### REPERCUSIÓN EN EL PERFIL PROFESIONAL

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.

### RECOMENDACIONES AL ALUMNADO

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.

### COMPETENCIAS

#### COMPETENCIAS BÁSICAS

CB1 - Que los estudiantes hayan demostrado poseer y comprender conocimientos en un área de estudio que parte de la base de la educación secundaria general, y se suele encontrar a un nivel que, si bien se apoya en libros de texto avanzados, incluye también algunos aspectos que implican conocimientos procedentes de la vanguardia de su campo de estudio.

CB2 - Que los estudiantes sepan aplicar sus conocimientos a su trabajo o vocación de una forma profesional y posean las competencias que suelen demostrarse por medio de la elaboración y defensa de argumentos y la resolución de problemas dentro de su área de estudio.

CB3 - Que los estudiantes tengan la capacidad de reunir e interpretar datos relevantes (normalmente dentro de su área de estudio) para emitir juicios que incluyan una reflexión sobre temas relevantes de índole social, científica o ética.

CB4 - Que los estudiantes puedan transmitir información, ideas, problemas y soluciones a un público tanto especializado

como no especializado.

CB5 - Que los estudiantes hayan desarrollado aquellas habilidades de aprendizaje necesarias para emprender estudios posteriores con un alto grado de autonomía.

B1 - Capacidad de análisis y síntesis.

B3 - Comunicación oral y escrita en la lengua nativa.

B6 - Resolución de problemas.

B7 - Capacidad de adaptarse a nuevas situaciones y toma de decisiones.

B9 - Razonamiento crítico.

B10 - Capacidad de aprendizaje autónomo para el desarrollo continuo profesional.

### COMPETENCIAS GENERALES

CG1 - Que los estudiantes hayan desarrollado y demostrado poseer habilidades de aprendizaje y conocimientos procedentes de su campo de estudio, siendo capaces de aplicarlos en su trabajo, interpretando datos relevantes para emitir juicios de temas de diversa índole pudiendo transmitirlos a un público tanto especializado como no especializado.

### COMPETENCIAS TRANSVERSALES

### COMPETENCIAS ESPECÍFICAS

C1 - Conocer los aspectos principales de terminología química, nomenclatura, convenios y unidades.

C4 - Conocer las técnicas principales de investigación estructural, incluyendo espectroscopía.

C5 - Conocer las características de los diferentes estados de la materia y las teorías empleadas para describirlos.

C6 - Conocer los principios de mecánica cuántica y su aplicación en la descripción de la estructura y propiedades de átomos y moléculas.

C7 - Conocer los principios de termodinámica y sus aplicaciones en Química.

C8 - Conocer la cinética del cambio químico, incluyendo catálisis. Interpretación mecanicista de las reacciones químicas.

C14 - Conocer la relación entre propiedades macroscópicas y propiedades de átomos y moléculas individuales: incluyendo macromoléculas (naturales y sintéticas), polímeros, coloides y otros materiales.

Q1 - Capacidad para demostrar el conocimiento y comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionadas con la química.

Q2 - Capacidad de aplicar dichos conocimientos a la resolución de problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados.

Q5 - Competencia para presentar, tanto en forma escrita como oral, material y argumentación científica a una audiencia especializada.

Q6 - Destreza en el manejo y procesado informático de datos e información química.

P1 - Habilidad para manipular con seguridad materiales químicos, teniendo en cuenta sus propiedades físicas y químicas, incluyendo cualquier peligro específico asociado con su uso.

P3 - Habilidad para la observación, seguimiento y medida de propiedades, eventos o cambios químicos, y el registro sistemático y fiable de la documentación correspondiente.

P4 - Habilidad para manejar instrumentación química estándar, como la que se utiliza para estudios estructurales y separaciones.

P5 - Interpretación de datos procedentes de observaciones y medidas en el laboratorio en términos de su significación y de las teorías que la sustentan.

P6 - Capacidad para realizar valoraciones de riesgos relativos al uso de sustancias químicas y procedimientos de laboratorio.

## TEMARIO Y DESCRIPCIÓN DE LOS CONTENIDOS

### TEORÍA

Tema 1. - Fundamentos de la mecánica cuántica

Tema 2. – Traslación, vibración y rotación en mecánica cuántica

Tema 3. - El átomo de hidrógeno

Tema 4. - Métodos aproximados en mecánica cuántica

Tema 5. - Átomos polielectrónicos y espectroscopia atómica

Tema 6. - Sistemas moleculares y espectroscopias

Tema 7. - Espectroscopia de microondas y Raman rotacional

Tema 8. - Espectroscopia de infrarrojo y Raman vibracional

Tema 9. - Espectroscopia electrónica molecular

Tema 10.- Espectroscopia de resonancia

## PRÁCTICAS DE LABORATORIO

- Cálculos mecano-cuánticos

## METODOLOGÍA DOCENTE

Grupo grande	<ul style="list-style-type: none"> <li>Clases presenciales relativas a los contenidos teóricos y prácticas (problemas) de la asignatura, utilizando recursos didácticos tales como transparencias, presentaciones informatizadas y videos.</li> <li>Resolución de dudas.</li> </ul>
Prácticas de laboratorio	<ul style="list-style-type: none"> <li>Prácticas de laboratorio con grupos reducidos manejo de técnicas experimentales, discusión de resultados, obtención de conclusiones, presentación de una memoria final.</li> <li>Resolución de dudas.</li> </ul>

## CRONOGRAMA ORIENTATIVO I

SEMANAS (S):	S1	S2	S3	S4	S5	S6	S7	S8	S9	S10	S11	S12	S13	S14	S15
GRUPO GRANDE	T1	T1	T2	T2	T3	T3/T4	T4/T5	T5	T6	T6	T7	T7/T8	T8	T9	T10
GRUPO REDUCIDO															
PRÁCTICAS DE LABORATORIO					L5	L1	L2	L3	L4						
PRÁCTICAS DE INFORMÁTICA															
PRÁCTICAS DE CAMPO															

## EVALUACIÓN DE LA ASIGNATURA

PRIMERA EVALUACIÓN ORDINARIA (FEBRERO/JUNIO)

EVALUACIÓN CONTINUA

Para la evaluación continua se considerará los siguientes apartados: i) la participación activa en las clases teóricas (10%) ii) la participación activa en las sesiones prácticas (10%) iii) la utilización de tutorías individualmente o en grupos pequeños (10%) iv) un examen escrito que constará de preguntas teóricas y problemas sobre el temario completo de la asignatura (60 %) (o de los contenidos de los temas 7 a 10 si se ha superado la evaluación parcial, 24%) y un examen escrito al final del periodo de prácticas (10 %). Se considerará superado cada examen si se alcanza una calificación de 5.0 puntos sobre 10. Sólo aprobando ambos exámenes se hará la media ponderada y se sumará la calificación de los ítems i)-iii).

### EVALUACIÓN FINAL

La evaluación única final consistirá en un examen escrito que constará de preguntas teóricas y problemas sobre el temario completo de la asignatura (80 %) y un examen escrito sobre el contenido de las prácticas (20 %). Se considerará superado cada examen si se alcanza una calificación de 5 puntos sobre 10. Sólo aprobando ambas pruebas finales se hará la media ponderada y se considerará aprobada la asignatura.

Se recuerda que para optar por el sistema de evaluación única y conforme al artículo 8 del Reglamento de Evaluación para las Titulaciones de Grado y Máster Oficial de la Universidad de Huelva (13 de marzo de 2019), el/la estudiante deberá comunicarlo en las dos primeras semanas de impartición de la asignatura, salvo causas sobrevenidas contempladas en el mismo artículo. La comunicación se realizará enviando un correo electrónico al coordinador de la asignatura, que responderá acusando su recibo.

### ¿Contempla una evaluación parcial?

SÍ

Se realizará un examen escrito que constará de cuestiones teóricas, teórico-prácticas y problemas sobre los contenidos de los temas 1 a 6. Si se supera la calificación de 5.0 podrá considerarse superada la prueba y los contenidos correspondientes no serán evaluados en la prueba final. Esta prueba parcial supone el 60% de la calificación teórica de la asignatura (36% del total de la asignatura).

Esta prueba la podrán realizar los alumnos/as que se hayan acogido al sistema de evaluación continua y si la superan sólo contabilizará en la convocatoria ordinaria I.

### SEGUNDA EVALUACIÓN ORDINARIA

En la convocatoria ordinaria II existirán dos sistemas de evaluación

Evaluación continua que consistirá en la media ponderada de i) la participación activa en las clases teóricas (10%) ii) la participación activa en las sesiones prácticas (10%) iii) la utilización de tutorías individualmente o en grupos pequeños (10%) iv) un examen escrito que constará de preguntas teóricas y problemas sobre el temario completo de la asignatura (60 %) y un examen escrito sobre el contenido de las prácticas (10 %). Se considerará superado cada examen si se alcanza una calificación de 5.0 puntos sobre 10. Sólo aprobando ambos exámenes se hará la media ponderada y se sumará la calificación de los ítems i)-iii). Todo alumno/a que en la convocatoria ordinaria I haya obtenido una calificación de 5 puntos o superior en el examen correspondiente al contenido práctico no tendrá que realizar esta prueba en la convocatoria ordinaria II.

Evaluación única final que consistirá en un examen escrito que constará de preguntas teóricas y problemas sobre el temario completo de la asignatura (80 %) y un examen escrito sobre el contenido de las prácticas (20 %). Se considerará superado cada examen si se alcanza una calificación de 5 puntos sobre 10. Sólo aprobando ambas pruebas finales se hará la media ponderada y se considerará aprobada la asignatura.

### TERCERA EVALUACIÓN ORDINARIA Y OTRAS EVALUACIONES

En la convocatoria ordinaria III solo existirá el sistema de evaluación única final que consistirá en un examen escrito que constará de preguntas teóricas y problemas sobre el temario completo de la asignatura (80 %) y un examen escrito sobre el contenido de las prácticas (20 %). Se considerará superado cada examen si se alcanza una calificación de 5 puntos sobre 10. Sólo aprobando ambas pruebas finales se hará la media ponderada y se considerará aprobada la asignatura.

### OTROS CRITERIOS DE EVALUACIÓN



Universidad  
de Huelva

# GUÍA DOCENTE

Curso 2021/2022



¿Contempla la posibilidad de subir nota una vez realizadas las pruebas?

NO

Requisitos para la concesión de matrícula de honor

Se asignará a la mayor calificación obtenida cada año, siempre que supere los 9.0 puntos en la primera evaluación ordinaria

## REFERENCIAS

### BÁSICAS

- 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. Físicoquímica, 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.