



FACULTAD DE CIENCIAS EXPERIMENTALES

# GUIA DOCENTE

CURSO 2022-23

## GRADO EN QUÍMICA

### DATOS DE LA ASIGNATURA

**Nombre:**

QUÍMICA CUÁNTICA Y ESPECTROSCOPIA

**Denominación en Inglés:**

QUANTUM CHEMISTRY AND SPECTROSCOPY

**Código:**

757509213

**Tipo Docencia:**

Presencial

**Carácter:**

Obligatoria

**Horas:**

	<b>Totales</b>	<b>Presenciales</b>	<b>No Presenciales</b>
<b>Trabajo Estimado</b>	225	90	135

**Créditos:**

<b>Grupos Grandes</b>	<b>Grupos Reducidos</b>			
	<b>Aula estándar</b>	<b>Laboratorio</b>	<b>Prácticas de campo</b>	<b>Aula de informática</b>
7	0	2	0	0

**Departamentos:**

ING. QUIM., Q. FISICA Y C. MATERIALES

**Áreas de Conocimiento:**

QUIMICA FISICA

**Curso:**

3º - Tercero

**Cuatrimestre**

Segundo cuatrimestre

## DATOS DEL PROFESORADO (\*Profesorado coordinador de la asignatura)

Nombre:	E-mail:	Teléfono:
* Manuel Lopez Lopez	manuel.lopez@diq.uhu.es	959 218 206
Jose Joaquin Maraver Puig	maraver@diq.uhu.es	959 218 200

### Datos adicionales del profesorado (Tutorías, Horarios, Despachos, etc... )

#### **Prof. 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

TUTORÍAS: Lunes, miércoles y jueves 12:00-14:00 h

#### **Prof. José Joaquín Maraver Puig**

DEPARTAMENTO INGENIERÍA QUÍMICA, QUÍMICA FÍSICA Y CIENCIAS DE LOS MATERIALES

ÁREA DE CONOCIMIENTO QUÍMICA FÍSICA

UBICACIÓN FEXP P3-N6-13

CORREO ELECTRÓNICO maraver@diq.uhu.es TELÉFONO 959218200

TUTORÍAS: Lunes, martes y miércoles 17:30-19:30 h

## DATOS ESPECÍFICOS DE LA ASIGNATURA

### 1. Descripción de Contenidos:

#### 1.1 Breve descripción (en Castellano):

Descripción de contenidos: Química cuántica, aplicación al estudio de sistemas sencillos, átomos y moléculas, Interacción entre radiación y materia, espectroscopia de absorción, emisión y dispersión, RMN, aplicación de espectroscopías al estudio de sistemas quimicofísicos, laboratorio de cálculo mecanocuántico.

#### 1.2 Breve descripción (en Inglés):

Description of contents: Quantum chemistry, application to the study of simple systems, atoms and molecules, interaction between radiation and matter, absorption, emission and scattering spectroscopy, NMR, application of spectroscopies to the study of chemico-physical systems, laboratory of quantum-mechanical calculation.

### 2. Situación de la asignatura:

#### 2.1 Contexto dentro de la titulación:

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.

#### 2.2 Recomendaciones

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.

### 3. Objetivos (Expresados como resultado 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.

#### 4. Competencias a adquirir por los estudiantes

##### 4.1 Competencias específicas:

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

**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.

**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.

**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.

**C1:** Conocer los aspectos principales de terminología química, nomenclatura, convenios y unidades

#### 4.2 Competencias básicas, generales o transversales:

**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.

**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.

**CT1:** Dominar correctamente la lengua española, los diversos estilos y los lenguajes específicos necesarios para el desarrollo y comunicación del conocimiento en el ámbito científico y académico.

**CT2:** Desarrollo de una actitud crítica en relación con la capacidad de análisis y síntesis.

## 5. Actividades Formativas y Metodologías Docentes

### 5.1 Actividades formativas:

- Grupo teórico práctico.
- Grupo docente de laboratorio.
- Trabajo individual.

## 5.2 Metodologías Docentes:

- Clases presenciales relativas a los contenidos teóricos y prácticas (problemas) de la asignatura, utilizando recursos didácticos tales como transparencias, presentaciones informatizadas y videos.
- Prácticas de laboratorio con grupos reducidos manejo de técnicas experimentales, discusión de resultados, obtención de conclusiones, presentación de una memoria final.
- Resolución de dudas.

## 5.3 Desarrollo y Justificación:

1. Impartición de clases teóricas. Los recursos utilizados son la pizarra y proyecciones con ordenador de apoyo con figuras, esquemas y tablas. Las clases se desarrollan de manera interactiva con los/las estudiantes, discutiendo con ellos/ellas los aspectos que resultan más dificultosos o especialmente interesantes de cada tema.

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.

3. Realización de sesiones Prácticas de cálculos teóricos. Cada tema experimental es introducido mediante un guión. A partir del estudio/repaso de los aspectos teóricos del cálculo mecanocuántico el alumnado 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 cálculo mecanocuántico en concreto. Realización del trabajo práctico por parte del alumnado con un estrecho seguimiento del profesorado de la asignatura. Y, por último, el análisis de los resultados obtenidos.

4.- Realización de tutorías personales o colectivas para resolución de dudas.

## 6. Temario Desarrollado

### 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

## **7. Bibliografía**

### 7.1 Bibliografía básica:

- 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.: Espectroscopia, 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 Espectroscopia Molecular, Ed. del Castillo, Madrid, 1977.

### 7.2 Bibliografía complementaria:

## 8. Sistemas y criterios de evaluación

### 8.1 Sistemas de evaluación:

- Examen final.
- Evaluación continua.

### 8.2 Criterios de evaluación relativos a cada convocatoria:

#### 8.2.1 Convocatoria I:

Evaluación continua que consistirá en la media ponderada de los siguientes ítems: 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).

¿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.

#### 8.2.2 Convocatoria II:

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.

#### 8.2.3 Convocatoria III:

En la convocatoria ordinaria III solo existirá el sistema de evaluación única final (véase evaluación única final de la convocatoria III).

#### 8.2.4 Convocatoria extraordinaria:

En la convocatoria extraordinaria de noviembre sólo existirá el sistema de evaluación única final (véase evaluación única final de la convocatoria extraordinaria de noviembre).

#### 8.3 Evaluación única final:

##### 8.3.1 Convocatoria I:

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.

##### 8.3.2 Convocatoria 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.

##### 8.3.3 Convocatoria III:

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.

##### 8.3.4 Convocatoria Extraordinaria:

En la convocatoria extraordinaria de noviembre 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.

9. Organización docente semanal orientativa:							
Fecha	Grupos Grandes	G. Reducidos				Pruebas y/o act. evaluables	Contenido desarrollado
		Aul. Est.	Lab.	P. Camp	Aul. Inf.		
01-02-2023	5	0	0	0	0		Tema 1
06-02-2023	5	0	0	0	0		Tema 1
13-02-2023	5	0	20	0	0	Examen de prácticas de laboratorio G5	Tema 2 Contenido práctico (cálculos mecanocuánticos) G5
20-02-2023	5	0	20	0	0	Examen de prácticas de laboratorio G1	Tema 2 Contenido práctico (cálculos mecanocuánticos) G1
27-02-2023	5	0	0	0	0		Tema 3
06-03-2023	5	0	20	0	0	Examen de prácticas de laboratorio G2	Tema 3 Contenido práctico (cálculos mecanocuánticos) G2
13-03-2023	5	0	20	0	0	Examen de prácticas de laboratorio G3	Tema 4 Contenido práctico (cálculos mecanocuánticos) G3
20-03-2023	5	0	20	0	0	Examen de prácticas de laboratorio G4	Tema 5 Contenido práctico (cálculos mecanocuánticos) G4
27-03-2023	5	0	0	0	0		Tema 5
10-04-2023	5	0	0	0	0		Tema 6
17-04-2023	4	0	0	0	0		Tema 6
24-04-2023	4	0	0	0	0		Tema 7
01-05-2023	4	0	0	0	0	Examen parcial	Tema 8
08-05-2023	4	0	0	0	0		Tema 9
15-05-2023	4	0	0	0	0		Tema 10
<b>TOTAL</b>	<b>70</b>	<b>0</b>	<b>100</b>	<b>0</b>	<b>0</b>		