

GRADO EN QUÍMICA

DATOS DE LA ASIGNATURA

ASIGNATURA	QUÍMICA CUÁNTICA Y ESPECTROSCOPIA	CÓDIGO	757509213
MÓDULO	FUNDAMENTAL	MATERIA	Q. FÍSICA
CURSO	3.º	CUATRIMESTRE	2.º
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	4.41	2.59	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 P3-N6-15

CORREO ELECTRÓNICO manuel.lopez@diq.uhu.es

TELÉFONO 88206

URL WEB

CAMPUS VIRTUAL MOODLE

HORARIO DE TUTORÍAS

PRIMER SEMESTRE

LUNES	MARTES	MIÉRCOLES	JUEVES	VIERNES
13:00 - 14:00	13:00 - 14:00	13:00 - 14:00		
16:00 - 17:00	16:00 - 17:00	16:00 - 17:00		

SEGUNDO SEMESTRE

LUNES	MARTES	MIÉRCOLES	JUEVES	VIERNES
11:30 - 14:00	13:00 - 14:00	11:30 - 14:00		

OTROS DOCENTES

NOMBRE JUAN DANIEL MOZO LLAMAZARES

DEPARTAMENTO INGENIERÍA QUÍMICA, QUÍMICA FÍSICA Y CIENCIAS DE LOS MATERIALES

ÁREA DE CONOCIMIENTO QUÍMICA FÍSICA

UBICACIÓN FEXP P3-N6-14

CORREO ELECTRÓNICO jdaniel.mozo@diq.uhu.es

TELÉFONO 959219992

URL WEB

CAMPUS VIRTUAL MOODLE

HORARIO DE TUTORÍAS

PRIMER SEMESTRE				
LUNES	MARTES	MIÉRCOLES	JUEVES	VIERNES
11:30 - 13:30	11:30 - 13:30	11:30 - 13:30		
SEGUNDO SEMESTRE				
LUNES	MARTES	MIÉRCOLES	JUEVES	VIERNES
11:30 - 13:30	11:30 - 13:30	11:30 - 13:30		

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 (1.5 sem)

PRÁCTICAS DE LABORATORIO

- Cálculos mecano cuánticos

METODOLOGÍA DOCENTE

Grupo grande

- Clases presenciales relativas a los contenidos teóricos y prácticas (problemas) de la asignatura, utilizando recursos didácticos tales como transparencias, presentaciones informatizadas y videos.

Grupo reducido

- Seminarios y conferencias sobre temas específicos de los contenidos propios de la asignatura, presentación de material de video y multimedia para ilustrar temas del programa teórico.
- Seminarios tutorizados de resolución de problemas y de supuestos prácticos.
- Resolución de dudas.

Prácticas de laboratorio

- Prácticas de laboratorio con grupos reducidos manejo de técnicas experimentales, discusión de resultados, obtención de conclusiones, presentación de una memoria final.
- Resolución de dudas.

CRONOGRAMA ORIENTATIVO

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	R1	R1	R1	R1	R1	R1	R1	R1	R1	R1	R1	R1			
PRÁCTICAS DE LABORATORIO					L1	L2									
PRÁCTICAS DE INFORMÁTICA															
PRÁCTICAS DE CAMPO															

EVALUACIÓN DE LA ASIGNATURA

PRIMERA EVALUACIÓN ORDINARIA (FEBRERO/JUNIO)

EVALUACIÓN CONTINUA

PORCENTAJE

30 %

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%)

Existe opción alternativa a la evaluación continua arriba contemplada

NO

EVALUACIÓN FINAL

PORCENTAJE

70 %

La evaluación final consistirá en un único 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 ambas pruebas finales se hará la media ponderada y se sumará la calificación de la evaluación continua.

¿Contempla una evaluación parcial voluntaria?

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)

SEGUNDA EVALUACIÓN ORDINARIA (SEPTIEMBRE) Y OTRAS EVALUACIONES

La evaluación final consistirá en un único 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

¿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. 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.

ESPECÍFICAS

OTROS RECURSOS