

DATOS DE LA ASIGNATURA							
<b>Titulación:</b>	LICENCIADO EN QUÍMICA				<b>Plan:</b>	2004	
<b>Asignatura:</b>	Química Cuántica				<b>Código:</b>	8026	
<b>Créditos Totales LRU:</b>	4,5	<b>Teóricos:</b>	3,0	<b>Prácticos:</b>	1,5		
<b>Créditos Totales ECTS</b>	3,8	<b>Teóricos:</b>	2,5	<b>Prácticos:</b>	1,3		
<b>Descriptor (BOE):</b>	Química Cuántica						
<b>Departamento:</b>	Ing. Química, Química Física y Química Orgánica		<b>Área de Conocimiento:</b>		Química Física		
<b>Tipo:</b> (troncal/obligatoria/optativa)	Troncal	<b>Curso:</b>	3	<b>Cuatrimestre:</b>	2	<b>Ciclo:</b>	1

PROFESOR/ES		E-mail	Ubicación	Teléfono
<b>Responsable:</b>	Manuel López López	<a href="mailto:manuel.lopez@diq.uhu.es">manuel.lopez@diq.uhu.es</a>	Facultad de Ciencias Experimentales 3623	959218206
<b>Dirección página WEB de la asignatura</b>				

<b>Contexto de la asignatura</b>	<u>Enquadre en el Plan de Estudios</u>
	<p>La asignatura "Química Cuántica" 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>
	<u>Repercusión en el perfil profesional</u>
	<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.</p>

<p><b>Objetivo General de la Asignatura:</b></p>	<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"> <li>- Entender y comprender los Fundamentos de la Mecánica Cuántica y los métodos teóricos de estudio de las estructuras atómica y molecular.</li> <li>-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.</li> <li>-Estudiar y comprender la descripción de modelos teóricos de cálculo de orbitales moleculares y su relación con datos experimentales</li> </ul>
<p><b>Competencias y destrezas teórico-prácticas a adquirir por el alumno:</b></p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>-Capacidad de comprender los principios básicos en que se fundamenta esta parte de la Química y cómo a partir de ellos se puede obtener información sobre la estructura atómica y molecular.</li> <li>-Capacidad de relacionar los distintos campos de la ciencia, especialmente la estrecha relación de la Química Cuántica con la física y las matemáticas.</li> <li>-Capacidad de resolver problemas y cuestiones relacionados con los conocimientos adquiridos.</li> <li>-Capacidad de estudiar y comprender la descripción de modelos teóricos de cálculo de orbitales moleculares y su relación con datos experimentales.</li> <li>-Capacidad de utilizar la informática y procesar datos</li> </ul>
<p><b>Contribución al desarrollo de habilidades y destrezas Genéricas:</b></p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Capacidad de programación en el trabajo requerido para esta asignatura.</li> <li>• Capacidad de trabajo en grupo.</li> <li>• Capacidad para exponer el trabajo desarrollado y defender los argumentos que le conducen a unos determinados resultados.</li> <li>• Fomento del espíritu crítico</li> </ul>
<p><b>Prerrequisitos:</b></p>	
<p><b>Recomendaciones</b></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><b>Bloques Temáticos:</b></p>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. FUNDAMENTOS DE LA MECÁNICA CUÁNTICA (Temas 1-3)</li> <li>2. ESTRUCTURA ATÓMICA (Temas 4-6)</li> <li>3. ESTRUCTURA MOLECULAR (Tema 7)</li> </ol>
<p><b>Competencias a adquirir por Bloques Temáticos</b></p>	<p>VER ANEXO 1</p>

<b>Temario Teórico y Planificación Temporal:</b>	<p>Tema 1. FUNDAMENTOS DE LA MECÁNICA CUÁNTICA (2 semanas)  Tema 2. TRASLACIÓN Y VIBRACIÓN EN MECÁNICA CUÁNTICA (1.5 semanas)  Tema 3. ROTACIÓN EN MECÁNICA CUÁNTICA: MOMENTO ANGULAR (1 semana)  Tema 4. EL ÁTOMO DE HIDRÓGENO (1.5 semanas)  Tema 5. MÉTODOS APROXIMADOS EN MECÁNICA CUÁNTICA (3 semanas)  Tema 6. ÁTOMOS POLIELECTRÓNICOS (1.5 semanas)  Tema 7. MOLÉCULAS (4.5 semanas)</p>		
<b>Temario Práctico y Planificación Temporal:</b>	<p>-Cálculos mecano cuánticos de orbitales moleculares, optimización de geometría y modos de vibración (4 sesiones de 4 horas aprox.).</p>		
<b>Metodología Docente Empleada:</b>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. <u>Impartición de clases teóricas.</u> 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.</li> <li>2. <u>Realización de sesiones Prácticas:</u> 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.</li> <li>3. <u>Realización de actividades académicas dirigidas.</u> 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 (<u>ver anexo 2</u>).</li> </ol>		
<b>Técnicas Docentes:</b> (marcar con X lo que proceda)	Sesiones teóricas X	Presentaciones PC X	Diapositivas
	Transparencias X	Sesiones prácticas X	Lectura de artículos X
	Visitas / excursiones	Web específicas	Otras (indicar)

<p><b>Criterios de Evaluación:</b> <b>(detallar)</b></p>	<p>La calificación final de la asignatura se obtendrá con los siguientes sumandos:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. El 50% de la calificación de la asignatura corresponderá a un examen final. Dicho examen constará de cuestiones teórica, teórico-prácticas y problemas.</li> <li>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.</li> <li>3. Y el 30% restante por la realización de las prácticas y la presentación del informe científico de las mismas de manera individual.</li> </ol>
<p><b>Bibliografía Fundamental:</b> <b>(indicar las 5 más significativas)</b></p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Bertran Rusca, J.; Branchadell Gallo, V.; Moreno Ferrer, M.; Sodupe Roure, M.; <i>Química Cuántica</i>, Síntesis, 2002.</li> <li>• Levine, I.N., <i>Química Cuántica</i>, Prentice Hall, 2001.</li> <li>• Atkins, P.W.; Friedman, R.S.; <i>Molecular Quantum Mechanics 4<sup>th</sup> ed.</i>, Oxford University Press, 2005.</li> <li>• Levine, I.N. <i>Fisicoquímica</i>, 5<sup>a</sup> ed., vol 1 y 2, McGraw-Hill Interamericana de España, S.A, 2004</li> <li>• Bertrán Rusca, J.; Núñez Delgado, J. (coords.), <i>Química Física vols. 1 y 2</i>, Ariel Ciencia, 2002.</li> </ul>
<p><b>Bibliografía Complementaria:</b> <b>(incluir, si procede páginas Web)</b></p>	<p><a href="http://www.sc.ehu.es/sbweb/fisica/cuantica/FisicaModerna.htm">http://www.sc.ehu.es/sbweb/fisica/cuantica/FisicaModerna.htm</a> <a href="http://www.nuclecu.unam.mx/~vieyra/cuant1.html">http://www.nuclecu.unam.mx/~vieyra/cuant1.html</a></p>

### Horas de trabajo del alumno (ver tabla ECTS)

Presencial			Estudio			AAD (especificar)	Otros Trabajos	Examen incluyendo preparación	TOTAL
Teoría	Problemas	Prácticas	Teoría	Problemas	Prácticas				
21	0	15	26,2	0	11,3	9 (anexo 2)		18,8	101,2

(AAD = Actividades Académicas Dirigidas)

<p>CRONOGRAMA</p>	<p>(ver anexo 3)</p>
-------------------	----------------------

## ANEXO 1

### Competencias a adquirir por Bloques Temáticos

La siguiente Tabla recoge las capacidades a adquirir por el estudiante en las distintas unidades temáticas de la asignatura. En cada una de las unidades temáticas se entienden incluidas todas las actividades derivadas de la docencia teórica, práctica y dirigida.

Capacidad	Fundamentos	Estructura atómica	Estructura molecular
Conocimiento y comprensión de conceptos básicos	X	X	X
Planificación del trabajo	X	X	X
Análisis y discusión de bibliografía	X	X	X
Análisis y discusión de datos	X	X	X
Resolución de cuestiones y problemas	X	X	X
Trabajo individual	X	X	X
Trabajo en equipo	X	X	X
Destreza técnica	X	X	X

## Anexo 2

### **Relación de Actividades Académicas Dirigidas para la asignatura de Química Cuántica, de 3º curso de Ldo. en Química**

Se realizarán según el cronograma, para las distintas sesiones. Las AAD se realizarán sobre los distintos bloques temáticos de la asignatura, y lógicamente contribuirán de manera significativa a alcanzar las competencias indicadas en los bloques temáticos.

**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.

**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.

**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.

### ANEXO 3

#### **Cronograma orientativo (se indica la temporización de la asignatura por semanas)**

##### **Unidades temáticas:**

- B1. FUNDAMENTOS DE LA MECÁNICA CUÁNTICA (Temas 1-3)
- B2. ESTRUCTURA ATÓMICA (Temas 4-6)
- B3. ESTRUCTURA MOLECULAR (Tema 7)

##### Dedicación presencial (incluye actividades dirigidas)

Actividad	S1	S2	S3	S4	S5	S6	S7	S8	S9	S10	S11	S12	S13	S14	S15
Clases teóricas	B1	B1	B1	B1	B1/B2	B2	B2	B2	B2	B2	B2/B3	B3	B3	B3	B3
Clases Lab.													G1	G2	
Actividades dirigidas							G1	G2	G1	G2	G1	G2	G1	G2	G1/G2

Según consta en la tabla de adaptación ECTS de primer curso: (S1, S2, S3... : semana 1, semana 2, semana 3...)

Clases teóricas: 21 horas

Actividades Académicas Dirigidas: 9 horas. Cada grupo de Teoría (26) se dividirá en 2 grupos (G1 y G2) de 13 alumnos

Dedicación no presencial (según consta en la tabla de adaptación ECTS de primer curso)

Actividad	horas	S1	S2	S3	S4	S5	S6	S7	S8	S9	S10	S11	S12	S13	S14	S15
Estudio de teoría		1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
Estudio de problemas	26.2		1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0.2		
Estudio de prácticas	11.3													5.65	5.65	
Exámenes incluyendo preparación	18.8									0.8	3	3	3	3	3	3