



DATOS IDENTIFICATIVOS

Química física III: Química cuántica

Asignatura	Química física III: Química cuántica			
Código	V11G201V01303			
Titulación	Grado en Química			
Descriptores	Creditos ECTS	Seleccione	Curso	Cuatrimestre
	6	OB	3	1c
Lengua	#EnglishFriendly			
Impartición	Gallego			
Departamento	Química Física			
Coordinador/a	Mosquera Castro, Ricardo Antonio			
Profesorado	Hermida Ramón, José Manuel Mosquera Castro, Ricardo Antonio Peña Gallego, María de los Ángeles Pérez Barcia, Álvaro			
Correo-e	mosquera@uvigo.es			
Web				
Descripción general	Se presentan los fundamentos de la química cuántica que se aplican en modelos simples para describir: a) movimientos nucleares en moléculas; y b) la estructura electrónica de los átomos. Materia del programa English Friendly: Los/as estudiantes internacionales podrán solicitar al profesorado: a) materiales y referencias bibliográficas para el seguimiento de la materia en inglés, b) atender las tutorías en inglés, c) pruebas y evaluaciones en inglés.			

Resultados de Formación y Aprendizaje

Código	
A1	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
A5	Que los estudiantes hayan desarrollado aquellas habilidades de aprendizaje necesarias para emprender estudios posteriores con un alto grado de autonomía
B1	Capacidad de aprendizaje autónomo
B2	Capacidad de organización y planificación
B4	Capacidad de análisis y síntesis
C1	Capacidad para conocer y comprender los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química
C4	Utilizar adecuadamente herramientas informáticas para obtener información, procesar datos, realizar cálculos computacionales y calcular propiedades de la materia
C14	Coñecer os principios da mecánica cuántica e a súa aplicación na descrición da estrutura e as súas propiedades de átomos e moléculas
D1	Capacidad para resolver problemas

Resultados previstos en la materia

Resultados previstos en la materia	Resultados de Formación y Aprendizaje		
Escribir y aplicar los operadores fundamentales de la mecánica cuántica utilizando los conceptos básicos de la teoría de operadores para calcular funciones y valores propios, valores medios y más probables en los sistemas modelo (partícula en la caja, oscilador armónico, rotor rígido, modelo electrostático del átomo monoeléctrico).	B2	C1	D1
	B4	C14	
Describir las funciones y valores propios de los sistemas modelo.	B1	C1	
	B2	C14	
	B4		

Utilizar los métodos de variaciones y perturbaciones para tratar sistemas más complejos (átomos polieletrónicos, oscilador anarmónico, etc.)	A1 A5	B1 B2 B4	C1 C4 C14	D1
Plantear soluciones aproximadas para la ecuación de Schrödinger de átomos polieletrónicos y describir su estructura electrónica utilizando modelos de acoplamiento de momentos angulares.		B1 B2 B4	C1 C14	D1
Describir los espectros de átomos monoeléctricos y polieletrónicos.	A1 A5	B1 B2 B4	C1 C4 C14	D1
Aplicar la teoría de grupos de simetría en el contexto de la química	A1 A5	B2	C1	D1

Contenidos

Tema	
1. Fundamentos de la mecánica cuántica.	<p>1.1. Origen de la mecánica cuántica (hechos experimentales). Formalismos de la mecánica cuántica. Mecánica cuántica no relativista. Unidades atómicas.</p> <p>1.2. Existencia de la función de onda. Condiciones de buen comportamiento. Funciones de onda de una y varias partículas. Determinantes de Slater y sus propiedades. Interpretación de la función de onda. Normalización. Funciones de onda moleculares y atómicas. Separación de movimientos.</p> <p>1.3. Operadores. Hermiticidad. Espectros de valores para una magnitud. Ecuación de valores propios. Ortogonalidad. Conmutación. Operadores de momento angular. Operadores escalera. Operadores de simetría. Grupos puntuales de simetría. Clasificación de las funciones de onda por su simetría (especies de simetría). Tablas de caracteres.</p> <p>1.4. Valor medio. Valor más probable. Relaciones de indeterminación. Teoremas del hipervirial y virial.</p> <p>1.5. Evolución de la función de onda con el tiempo (Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo). Estados estacionarios (Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo).</p>
2. Traslación molecular	<p>2.1. Partícula libre en espacios monodimensionales y tridimensionales.</p> <p>2.2. Partícula en una caja monodimensional de paredes infinitas de potencial.</p> <p>2.3. Partícula en una caja tridimensional. Degeneración de los niveles.</p> <p>2.4. Partícula sometida a saltos de potencial. Coeficientes de reflexión y transmisión.</p> <p>2.5. Barreras de potencial no infinito. Efecto túnel.</p>
3. Tratamientos aproximados para resolver la ecuación de Schrödinger.	<p>3.1. Método de variaciones. Teorema de Eckart.</p> <p>3.2. Funciones variacionales tipo combinación lineal. Determinante secular.</p> <p>3.3. Teoría de perturbaciones independiente del tiempo en niveles no degenerados.</p> <p>3.4. Teoría de perturbaciones independiente del tiempo en niveles degenerados.</p> <p>3.5. Tratamiento semiclásico de la interacción radiación-materia: teoría de perturbaciones dependiente del tiempo. Consecuencias en la interacción inelástica radiación-materia. Integral momento dipolar de transición. Coeficientes de absorción y emisión estimulada. Coeficiente de emisión espontánea. Vida media de los estados excitados.</p> <p>3.6. Distribución de una muestra de partículas entre sus niveles de energía (estadística de Maxwell-Boltzmann). Intensidad de absorción y emisión de radiación.</p>
4. Rotación molecular.	<p>4.1. Moléculas diatómicas: Rotor rígido.</p> <p>4.2. Moléculas poliatómicas: trompos esféricos, simétricos y asimétricos. Tratamiento rígido</p> <p>4.3. Distorsión centrífuga en moléculas diatómicas.</p>
5. Vibración molecular.	<p>5.1. Oscilador armónico (moléculas diatómicas).</p> <p>5.2. Sistemas con osciladores armónicos acoplados (moléculas poliatómicas).</p> <p>5.3. Efecto de la simetría molecular.</p> <p>5.4. Limitaciones del modelo armónico. Oscilador anarmónico (moléculas diatómicas).</p>

6. Estructura electrónica: átomos monoeléctricos.

6.1. Modelo electrostático. Planteamiento de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. 6.2. Resultados del modelo electrostático. Orbitales hidrogenicos. 6.3. Espín electrónico. Acoplamiento espín-orbita. Estructura fina. 6.4. Estructura hiperfina. 6.5. Interpretación de espectros de átomos monoeléctricos. Efecto Zeeman.

7. Estructura electrónica: átomos polielectricos.

7.1. Modelo electrostático. Imposibilidad de resolver la ecuación de Schrödinger por vía exacta. 7.2. Descripción del método Hartree-Fock. Limitaciones. 7.3. Acoplamiento de momentos angulares. 7.4. Interpretación de espectros de átomos polielectricos.

Planificación

	Horas en clase	Horas fuera de clase	Horas totales
Lección magistral	24	48	72
Resolución de problemas	12	30	42
Prácticas de laboratorio	14	14	28
Examen de preguntas de desarrollo	2	3	5
Examen de preguntas de desarrollo	0	3	3

*Los datos que aparecen en la tabla de planificación son de carácter orientativo, considerando la heterogeneidad de alumnado

Metodologías

	Descripción
Lección magistral	El profesor expondrá los conceptos, métodos y conocimientos principales de cada tema. Orientará el trabajo autónomo del alumno señalando objetivos y planteando cuestiones y/o ejercicios. En el aula el alumno debe prestar atención a la exposición, tomar sus anotaciones y formular las preguntas que considere necesarias. En el trabajo autónomo el alumno debe completar los elementos del tema que quedasen como trabajo autónomo, resolver las cuestiones que se le hayan planteado, asimilar esta información y, en caso necesario, elaborar nuevas preguntas que formular al profesor en próximas sesiones o en tutorías.
Resolución de problemas	El profesor resolverá los ejercicios que considere fundamentales en cada tema. Planteará problemas para resolución autónoma del alumno y motivará la participación del alumnado, animando a que en parte de las sesiones los alumnos sean quienes resuelvan los problemas. El alumno debe asistir a estas clases con ánimo participativo, procurando entender la resolución de los ejercicios y conectarla con los conocimientos adquiridos en teoría. Debe desterrarse la modelización de problemas y su resolución mecánica. En el trabajo autónomo debe resolver los problemas propuestos e incluso buscar por si mismo otros relacionados.
Prácticas de laboratorio	Los profesores propondrán ejercicios más largos que los habituales de clases de problemas. En su gran mayoría se resolverán con ordenadores. Los alumnos deben actuar participativamente, pues ellos serán los encargados de obtener resultados a los ejercicios propuestos. En el trabajo autónomo deberán analizar los resultados obtenidos. En todo momento es importante que relacionen el trabajo realizado con lo estudiado en las lecciones magistrales.

Atención personalizada

Metodologías	Descripción
Lección magistral	El alumno podrá solicitar tutorías individualizadas para consultar las dudas que se vayan generando en su trabajo autónomo.
Resolución de problemas	El alumno podrá solicitar tutorías individualizadas para consultar las dudas que se vayan generando en su trabajo autónomo.
Prácticas de laboratorio	El alumno podrá solicitar tutorías individualizadas para consultar las dudas que se vayan generando en su trabajo autónomo.
Pruebas	Descripción
Examen de preguntas de desarrollo	El alumno podrá solicitar tutorías individualizadas para consultar las dudas que se vayan generando en su trabajo autónomo y para revisar los resultados de sus exámenes.
Examen de preguntas de desarrollo	

Evaluación

Descripción	Calificación	Resultados de Formación y Aprendizaje

Resolución de problemas	Durante las clases de problemas podrá plantearse, avisando con al menos un día de antelación, la resolución independiente y por escrito de uno de los problemas que se hayan propuesto en ese tema. Asimismo se valorará (solo de manera positiva) la resolución voluntaria de un problema por el alumno ante sus compañeros (en el encerado).	10	A1 A5	B2 C4 C14	C1 D1
Prácticas de laboratorio	La observación sistemática del trabajo realizado, la respuesta a las preguntas de los profesores, así como, en su caso, la elaboración de la memoria de una prácticas, serán valoradas. La realización satisfactoria de las prácticas es requisito imprescindible para aprobar la asignatura. En caso de no superar esta parte de la asignatura la calificación global no podrá exceder 4,0 sobre 10 puntos.	10	A1 A5	B1 B2 B4	C1 C4 C14 D1
Examen de preguntas de desarrollo	Durante el curso se realizarán los siguientes exámenes: a) Una prueba parcial que incluirá, probablemente, los temas 1, 2 y 3.	40	A1 A5	B1 B2 B4	C1 C14 D1
Examen de preguntas de desarrollo	b) Un examen final, con dos oportunidades, en las fechas que fije la Facultad: diciembre/enero la primera y junio/julio la segunda. Este incluirá en la primera oportunidad los temas 4, 5, 6 y 7, salvo para que aquellos alumnos que hayan optado por evaluación global. En la segunda oportunidad este examen comprenderá toda la materia del curso.	40	A1 A5	B1 B2 B4	C1 C4 C14 D1

Otros comentarios sobre la Evaluación

Norma 1: Para poder superar la materia es requisito indispensable haber realizado satisfactoriamente las prácticas. Para ello se requiere: a) haber asistido a todas las sesiones de prácticas o presentar un certificado que a juicio de los profesores acredite un motivo justificado para faltar a un máximo de 2 sesiones; y b) alcanzar un puntuación de 4,0 a juicio del profesor encargado. Si no se cumplen ambos requisitos la calificación global no podrá exceder 4,0 puntos.

Norma 2: En cada examen (sea parcial o final) se incluirán cuestiones teóricas y problemas numéricos. Para superar el examen, además de una calificación global de 5,0 puntos, será necesario obtener una puntuación mínima de 4,0 puntos sobre 10 en las cuestiones teóricas y de 3,0 puntos sobre 10 en los problemas numéricos. En caso contrario la calificación global del examen nunca podrá ser superior a 4,0 puntos.

Norma 3. Los estudiantes que, cumpliendo la "norma 2", alcancen una puntuación igual o superior a 4,2 sobre 10 puntos en la prueba parcial podrán presentarse al examen final (en cualquiera de sus oportunidades) respondiendo únicamente los ejercicios y cuestiones relacionados con los temas no incluidos en el examen parcial. Esta opción deberá ser indicada al profesor al comenzar el examen final. Al ejercitar esta opción la calificación global de los exámenes se obtendrá valorando igualmente ambos exámenes.

Norma 4. En caso de verificarse las normas anteriores, la calificación global de la materia será la más alta de: a) la obtenida en el examen (o conjunto de exámenes utilizando la norma 3); y b) la resultante de aplicar la siguiente ponderación: resolución de ejercicios 10%, prácticas de laboratorio 10%, conjunto de examen/es 80%.

Norma 5. En futuras convocatorias los estudiantes que hayan superado las prácticas podrán solicitar un certificado con la calificación obtenida en este curso. Este podrá servirles para solicitar a futuros profesores responsables la convalidación de las prácticas. Acceder a esa convalidación dependerá, obviamente, de la norma que sigan futuros profesores y no queda garantizada.

Norma 6. No se certificará que se ha aprobado un parcial con la materia suspensa. No se contempla mantener aprobadas partes de la asignatura entre cursos académicos diferentes.

Norma 7. Durante el proceso de calificación, el profesorado de la asignatura podrá requerir que, en entrevista personal, el estudiante despeje cualquier duda que afecte a la correcta calificación de cualquiera de sus exámenes. Este procedimiento se aplicará para casos de ilegibilidad, presunción de copia, u otros problemas que el profesorado considere que puedan solventarse de esta manera.

Norma 8. La detección por profesorado de la asignatura, o por quien vigile el examen, de cualquier tipo de copia supondrá la expulsión del examen y la calificación de cero, que será aplicada a esa oportunidad y a las siguientes de ese curso.

Fuentes de información

Bibliografía Básica

Bertrán, J.; Branchadell, V.; Moreno, M; Sodupe, M., **Química cuántica**, 1, Síntesis, 2000

Bibliografía Complementaria

Levine, I. N., **Química cuántica**, 5, Prentice-Hall, 2001

Atkins, P.; Friedman, R., **Molecular quantum mechanics**, 5, Oxford University Press, 2011

Pilar, F. L., **Elementary quantum chemistry**, 2, McGraw-Hill, 1990

McQuarrie, D. A., **Quantum chemistry**, 1, Viva Books, 2003

Recomendaciones

Asignaturas que continúan el temario

Química física IV: Estructura molecular y espectroscopia/V11G201V01307

Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente

Física: Física I/V11G201V01102

Física: Física II/V11G201V01107

Matemáticas: Matemáticas I/V11G201V01103

Matemáticas: Matemáticas II/V11G201V01108

Química: Química I/V11G201V01104
