

**Química Cuántica**

Código: 102503  
Créditos ECTS: 6

Titulación	Tipo	Curso	Semestre
2502444 Química	OB	2	1

### Contacto

Nombre: Miquel Moreno Ferrer

Correo electrónico: Miquel.Moreno@uab.cat

### Uso de idiomas

Lengua vehicular mayoritaria: catalán (cat)

Algún grupo íntegramente en inglés: No

Algún grupo íntegramente en catalán: Sí

Algún grupo íntegramente en español: No

### Equipo docente

Ricard Gelabert Peiri

### Prerequisitos

Es necesario tener aprobada la asignatura de Fundamentos de Química de primero. Se recomienda tener también aprobadas las asignaturas de Matemáticas y Física de primero.

### Objetivos y contextualización

El objetivo fundamental del curso es la adquisición de conocimientos básicos de Química Cuántica. Dado que la Química Cuántica trata con sistemas atómicos/moleculares para los que la física que se aplica es poco intuitiva, un objetivo importante del curso consiste en que los alumnos aprendan a razonar con los conceptos cuánticos y a deducir las implicaciones que conlleva a nivel macroscópico. Otro objetivo del curso consiste en que el alumno aprenda a usar las herramientas matemáticas e informáticas para resolver ejercicios de estructura atómica y molecular. El último objetivo es que el alumno se familiarice con el uso de programas de química computacional.

### Competencias

- Adaptarse a nuevas situaciones
- Aprender de forma autónoma
- Comunicarse de forma oral y escrita en la lengua nativa
- Demostrar iniciativa y espíritu emprendedor
- Demostrar motivación por la calidad
- Demostrar que comprende los conceptos, principios, teorías y hechos fundamentales de las diferentes áreas de la Química
- Gestionar la organización y planificación de tareas
- Gestionar, analizar y sintetizar información
- Mantener un compromiso ético
- Obtener información, incluyendo la utilización de medios telemáticos
- Operar con un cierto grado de autonomía e integrarse en poco tiempo en el ambiente de trabajo
- Poseer destreza para el cálculo numérico.

- Proponer ideas y soluciones creativas
- Razonar de forma crítica
- Reconocer y analizar problemas químicos y plantear respuestas o trabajos adecuados para su resolución, incluyendo en casos necesarios el uso de fuentes bibliográficas
- Resolver problemas y tomar decisiones
- Utilizar correctamente la lengua inglesa en el ámbito de la Química
- Utilizar la informática para el tratamiento y presentación de información

## Resultados de aprendizaje

1. Adaptarse a nuevas situaciones
2. Aprender de forma autónoma
3. Comunicarse de forma oral y escrita en la lengua nativa
4. Demostrar iniciativa y espíritu emprendedor
5. Demostrar motivación por la calidad
6. Describir los principios de la mecánica cuántica y reconocer su aplicación en la descripción de la estructura y las propiedades de átomos y moléculas
7. Gestionar la organización y planificación de tareas
8. Gestionar, analizar y sintetizar información
9. Identificar y analizar problemas relacionados con la estructura de las moléculas
10. Mantener un compromiso ético
11. Obtener información, incluyendo la utilización de medios telemáticos
12. Operar con un cierto grado de autonomía e integrarse en poco tiempo en el ambiente de trabajo
13. Poseer destreza para el cálculo numérico
14. Proponer ideas y soluciones creativas
15. Razonar de forma crítica
16. Resolver problemas y tomar decisiones
17. Resumir un texto científico relacionado con la asignatura en lengua inglesa
18. Utilizar la informática para el tratamiento y presentación de información

## Contenido

### Clases teóricas

#### Fundamentos de la mecánica Cuántica

Introducción histórica

Fundamentos matemáticos

Postulados de la Mecánica Cuántica

Principio de indeterminación de Heisenberg

Partícula en una caja

Oscilador armónico

#### Estructura atómica

Momento angular

Átomo de hidrógeno

Espín. Principio de antisimetría

Átomos polielectrónicos

#### Estructura molecular

Aproximación Born-Oppenheimer

Molécula  $H_2^+$

Aproximación OM-CLOA

Molécula de  $H_2$

Método de Hartree-Fock

Correlación electrónica

Métodos DFT

## Clases prácticas

**Sesión 1.** Estructura electrónica. Método Hartree-Fock

**Sesión 2.** Superficies de energía potencial I. Estructura molecular. Energías de reacción.

**Sesión 3.** Superficies de energía potencial II. Reactividad Química.

**Sesión 4.** Trabajo personal sobre reactividad Química.

## Metodología

La metodología docente se basa en cuatro tipos de actividades formativas: clases de teoría, clases de problemas, seminarios y sesiones prácticas.

### Clases de teoría

El professor/a explicará el contenido del programa con la ayuda de soportes audiovisuales. Éstos estarán a disposición del alumno en el Campus Virtual.

### Clases de problemas

A lo largo del curso se suministrarán los enunciados de los problemas que los alumnos deberán resolver. La resolución/planteamiento de algunos de estos problemas se hará en las clases de problemas bajo la dirección del profesor

### Seminarios

Para reforzar los contenidos de teoría el profesor distribuirá a los alumnos diferentes textos, ejercicios, etc. que estos tendrán que comentar/resolver en equipo fuera del aula. en estas sesiones se pondrán en común los conocimientos adquiridos.

### Clases prácticas

En las sesiones de prácticas los alumnos se familiarizarán con programas de química computacional. Las clases se realizarán por parejas en el aula informática. Los alumnos aplicarán los métodos de la química cuántica al estudio de la estructura y la reactividad de sistemas químicos. En la sesión final, bajo la dirección del profesor, aplicarán los conocimientos adquiridos a la resolución de un problema químico. Los resultados que se obtengan de este trabajo se recogerán en un informe escrito y se expondrán y discutirán en seminarios.

## Actividades

---

Título	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
<b>Tipo: Dirigidas</b>			
Clases de problemas	10	0,4	1, 2, 4, 8, 11, 14, 15, 16, 13
Clases de prácticas	16	0,64	1, 2, 3, 7, 8, 10, 11, 12, 15, 16, 17, 13, 18
Clases magistrales	32	1,28	1, 2, 5, 8, 10, 11, 15
Seminarios	2	0,08	3, 8, 15, 18
<b>Tipo: Supervisadas</b>			
Trabajo práctico	8	0,32	3, 4, 5, 7, 8, 10, 11, 14, 15, 16, 17, 13, 18
<b>Tipo: Autónomas</b>			
Estudio	47	1,88	7, 11, 16

## Evaluación

**Exámenes escritos:** Se programarán tres exámenes a lo largo del curso: dos parciales y un final. El alumno que apruebe las dos pruebas parciales NO tendrá que presentarse al examen final. El alumno que suspenda el primer parcial ya no podrá presentarse al segundo parcial y deberá ir directamente a realizar el examen de recuperación para aprobar la asignatura. La prueba FINAL de recuperación escrita evaluará toda la materia impartida durante el curso. Deberán realizarla los alumnos que hayan obtenido una nota inferior a 5 sobre 10 en alguna de las 2 pruebas parciales. Para los alumnos en esta situación la calificación definitiva será la de esta prueba final y deberá ser como mínimo de 4 sobre 10 para poder promediar con las notas de prácticas y las evidencias. También podrán presentarse a la prueba final los alumnos que deseen subir nota teniendo en cuenta que si entregan el examen la calificación definitiva será la de esta prueba final. Para participar en la recuperación es necesario que el alumno, como mínimo, se haya presentado a un parcial, haya realizado las prácticas y haya entregado al menos una evidencia.

**Prácticas:** La asistencia a las prácticas y la presentación de los informes es obligatoria. La última práctica se plantea como un proyecto abierto diferente para cada grupo. Los resultados obtenidos en esta práctica se presentarán y discutirán en un informe escrito en formato libre y en una exposición oral.

**Evidencias:** A lo largo del curso los alumnos deberán entregar un mínimo de dos ejercicios complementarios sobre el temario que se ha ido desarrollando en clase.

## Actividades de evaluación

Título	Peso	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
Evidencias	5%	2	0,08	5, 6, 8, 9, 10, 15, 16, 13
Exámenes escritos (parcial y final)	60%	8	0,32	3, 15, 16, 13
Prácticas	35%	25	1	1, 2, 3, 4, 5, 7, 8, 11, 12, 14, 15, 16, 17, 13, 18

## Bibliografía

### BIBLIOGRAFIA BÁSICA

"*Química Cuántica*" J. Bertran, V. Branchadell, M. Moreno, M. Sodupe, Ed. Síntesis. ISBN:84-7738-742-7 (versión electrónica a [www.sintesis.com](http://www.sintesis.com))

## **BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTARIA**

"Química Cuántica" I.N. Levine, Ed. prentice Hall. ISBN: 84-205-3096-4

"Absolutely Small" M. D. Fayer, Ed. McGraw-Hill. ISBN: 978-0814414880

"Elementary Quantum Chemistry" F.L. Pilar, Ed. McGraw-Hill. ISBN: 0-07-100857-8

"Molecular Quantum Mechanics" P.W. Atkins, Ed. Oxford, ISBN: 0-19-855170-3