



DATOS IDENTIFICATIVOS

Química física III: Química cuántica

Materia	Química física III: Química cuántica			
Código	V11G201V01303			
Titulación	Grao en Química			
Descritores	Creditos ECTS	Sinale	Curso	Cuadrimestre
	6	OB	3	1c
Lingua de impartición	#EnglishFriendly Galego			
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				
Descrición xeral	Preséntanse os fundamentos da química cuántica que se aplican en modelos simples para describir: a) movementos nucleares en moléculas; e b) a estrutura electrónica dos átomos. Materia do programa English Friendly. Os/ as estudantes internacionais poderán solicitar ao profesorado: a) materiais e referencias bibliográficas para o seguimento da materia en inglés, b) atender as titorías en inglés, c) probas e avaliacións en inglés.			

Resultados de Formación e Aprendizaxe

Código	
A1	Que os estudantes saiban aplicar os seus coñecementos ó seu traballo ou vocación dunha forma profesional e posúan as competencias que adoitan demostrarse por medio da elaboración e defensa de argumentos e a resolución de problemas dentro da súa área de estudo
A5	Que os estudantes desenvolvan aquelas habilidades de aprendizaxe necesarias para emprender estudos posteriores cun alto grao de autonomía
B1	Capacidade de aprendizaxe autónomo
B2	Capacidade de organización y planificación
B4	Capacidade de análise e síntese
C1	Capacidade para coñecer e comprender os feitos esenciais, conceptos, principios e teorías relacionadas coa Química
C4	Utilizar adecuadamente ferramentas informáticas para obter información, procesar datos, realizar cálculos computacionais e calcular propiedades da 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	Capacidade para resolver problemas

Resultados previstos na materia

Resultados previstos na materia	Resultados de Formación e Aprendizaxe			
Escribir e aplicar os operadores fundamentais da mecánica *cuántica utilizando os conceptos básicos da teoría de operadores para calcular funcións e valores propios, valores medios e máis probables nos sistemas modelo (partícula na caixa, *oscilador *armónico, *rotor ríxido, modelo *electrostático do átomo *monoelectrónico).	B2	C1	D1	
	B4	C14		
Descibir as funcións e valores propios dos sistemas modelo.	B1	C1		
	B2	C14		
	B4			
Utilizar os métodos de variacións e perturbacións para tratar sistemas máis complexos (átomos *polielectrónicos, *oscilador *anarmónico, etc.)	A1	B1	C1	D1
	A5	B2	C4	
		B4	C14	

Expor solucións aproximadas para a ecuación de *Schrödinger de átomos *polieletrónicos e describir a súa estrutura electrónica utilizando modelos de axuste de momentos angulares.		B1 B2 B4	C1 C14	D1
Describir os espectros de átomos *monoelectrónicos e *polieletrónicos.	A1 A5	B1 B2 B4	C1 C4 C14	D1
Aplicar a teoría de grupos de *simetría no contexto da química	A1 A5	B2	C1	D1

Contidos

Tema

1. Fundamentos da mecánica *cuántica.	1.1. Orixe da mecánica cuántica (feitos experimentais). Formalismos da mecánica cuántica. Mecánica cuántica non relativista. Unidades atómicas. 1.2. Existencia da función de onda. Condicións de bo comportamento. Funcións de onda dunha e varias partículas. Determinantes de Slater e as súas propiedades. Interpretación da función de onda. Normalización. Funcións de onda moleculares e atómicas. Separación de movementos. 1.3. Operadores. Hermiticidade. Espectros de valores para unha magnitude. Ecuación de valores propios. Ortogonalidade. Conmutación. Operadores de momento angular. Operadores escaleira. Operadores de simetría. Grupos puntuais de simetría. Clasificación das funcións de onda pola súa simetría (especies de simetría). Táboas de caracteres. 1.4. Valor medio. Valor máis probable. Relacións de indeterminación. Teoremas do hipervirial e do virial. 1.5. Evolución da función de onda co tempo (Ecuación de Schrödinger dependente do tempo). Estados estacionarios (Ecuación de Schrödinger independente do tempo).
2. Translación molecular	2.1. Partícula libre en espazos monodimensionais e tridimensionais. 2.2. Partícula nunha caixa monodimensional de paredes infinitas de potencial. 2.3. Partícula nunha caixa tridimensional. Dexeneración dos niveis. 2.4. Partícula sometida a saltos de potencial. Coeficientes de reflexión e transmisión. 2.5. Barreiras de potencial non infinito. Efecto túnel.
3. Tratamentos aproximados para resolver a ecuación de *Schrödinger.	3.1. Método de variacións. *Teorema de *Eckart. 3.2. Funcións *variacionais tipo combinación lineal. Determinante secular. 3.3. Teoría de perturbacións independente do tempo en niveis non *degenerados. 3.4. Teoría de perturbacións independente do tempo en niveis *degenerados. 3.5. Tratamento *semiclásico da interacción radiación-materia: teoría de perturbacións dependente do tempo. Consecuencias na interacción *inelástica radiación-materia. Integral momento *dipolar de transición. Coeficientes de absorción e emisión estimulada. Coeficiente de emisión espontánea. Vida media dos estados excitados. 3.6. Distribución dunha mostra de partículas entre os seus niveis de enerxía (estatística de *Maxwell-*Boltzmann). Intensidade de absorción e emisión de radiación.
4. Rotación molecular.	4.1. Moléculas *diatómicas: *Rotor ríxido. 4.2. Moléculas *poliatómicas: *trompos esféricos, simétricos e *asimétricos. Tratamento ríxido 4.3. *Distorsión *centrífuga en moléculas *diatómicas.
5. Vibración molecular.	5.1. *Oscilador *armónico (moléculas *diatómicas). 5.2. Sistemas con *osciladores *armónicos axustados (moléculas *poliatómicas). 5.3. Efecto da *simetría molecular. 5.4. Limitacións do modelo *armónico. *Oscilador *anarmónico (moléculas *diatómicas).
6. Estrutura electrónica: átomos *monoelectrónicos.	6.1. Modelo *electrostático. Formulación da ecuación de *Schrödinger independente do tempo. 6.2. Resultados do modelo *electrostático. Orbitais *hidrogénicos. 6.3. *Espín electrónico. Axuste *espín-*orbita. Estrutura fina. 6.4. Estrutura *hiperfina. 6.5. Interpretación de espectros de átomos *monoelectrónicos. Efecto *Zeeman.

7. Estrutura electrónica: átomos *polieletrónicos. 7.1. Modelo *electrostático. Imposibilidade de resolver a ecuación de *Schrödinger por vía exacta.
 7.2. Descrición do método *Hartree-*Fock. Limitacións.
 7.3. Axuste de momentos angulares.
 7.4. Interpretación de espectros de átomos *polieletrónicos.

Planificación

	Horas na aula	Horas fóra da aula	Horas totais
Lección maxistral	24	48	72
Resolución de problemas	12	30	42
Prácticas de laboratorio	14	14	28
Exame de preguntas de desenvolvemento	2	3	5
Exame de preguntas de desenvolvemento	0	3	3

*Os datos que aparecen na táboa de planificación son de carácter orientador, considerando a heteroxeneidade do alumnado.

Metodoloxía docente

	Descrición
Lección maxistral	O profesor exporá os conceptos, métodos e coñecementos principais de cada tema. Orientará o traballo autónomo do alumno sinalando obxectivos e expondo cuestións e/ou exercicios. Na aula o alumno debe prestar atención á exposición, tomar as súas anotacións e formular as preguntas que considere necesarias. No traballo autónomo o alumno debe completar os elementos do tema que quedasen como traballo autónomo, resolver as cuestións que se lle expuxeron, assimilar esta información e, en caso necesario, elaborar novas preguntas que formular ao profesor en próximas sesións ou en titorías.
Resolución de problemas	O profesor resolverá os exercicios que considere fundamentais en cada tema. Exporá problemas para resolución autónoma do alumno e motivará a participación do alumnado, animando a que en parte das sesións os alumnos sexan quen resolan os problemas. O alumno debe asistir a estas clases con ánimo participativo, procurando entender a resolución dos exercicios e conectala cos coñecementos adquiridos en teoría. Debe desterrarse modelizar problemas e a súa resolución mecánica. No traballo autónomo debe resolver os problemas propostos e mesmo buscar por si mesmo outros relacionados.
Prácticas de laboratorio	Os profesores proporán exercicios máis longos que os habituais de clases de problemas. Na súa gran maioría resolveranse con computadores. Os alumnos deben actuar participativamente, pois eles serán os encargados de obter resultados aos exercicios propostos. No traballo autónomo deberán analizar os resultados obtidos. En todo momento é importante que relacionen o traballo realizado co estudado nas leccións maxistrais.

Atención personalizada

Metodoloxías	Descrición
Lección maxistral	O alumno poderá solicitar titorías individualizadas para consultar as dúbidas que se vaian xerando no seu traballo autónomo.
Resolución de problemas	O alumno poderá solicitar titorías individualizadas para consultar as dúbidas que se vaian xerando no seu traballo autónomo.
Prácticas de laboratorio	O alumno poderá solicitar titorías individualizadas para consultar as dúbidas que se vaian xerando no seu traballo autónomo.
Probas	Descrición
Exame de preguntas de desenvolvemento	O alumno poderá solicitar titorías individualizadas para consultar as dúbidas que se vaian xerando no seu traballo autónomo e para revisar os resultados dos seus exames.
Exame de preguntas de desenvolvemento	

Avaliación

	Descrición	Cualificación	Resultados de Formación e Aprendizaxe			
Resolución de problemas	Durante as clases de problemas poderá exporse, avisando con polo menos un día de antelación, a resolución independente e por escrito dun dos problemas que se propuxeron nese tema. Así mesmo valorarase (só de maneira positiva) a resolución voluntaria dun problema polo alumno ante os seus compañeiros (no *encerado).	10	A1 A5	B2	C1 C4 C14	D1

Prácticas de laboratorio	A observación sistemática do traballo realizado, a resposta ás preguntas dos profesores, así como, no seu caso, a elaboración da memoria dunhas prácticas, serán valoradas. A realización satisfactoria das prácticas é requisito imprescindible para aprobar a materia. En caso de non superar esta parte da materia a cualificación global non poderá exceder 4,0 sobre 10 puntos.	10	A1 A5	B1 B2	C1 C4	D1 C14
Exame de preguntas de desenvolvemento	Durante o curso realizaranse os seguintes exames: a) Unha proba parcial que incluíra, probablemente, os temas 1, 2 e 3.	40	A1 A5	B1 B2	C1 C4	D1 C14
Exame de preguntas de desenvolvemento	b) Un examen final, con dúas oportunidades, nas datas que fixe a Facultade: decembro/xaneiro na primeira e xuño/xullo na segunda. Este exame incluíra na primeira oportunidade os temas 4, 5, 6 e 7, agás para os alumnos que optasen pola avaliación global. Na segunda oportunidade este examen comprenderá toda a materia do curso.	40	A1 A5	B1 B2	C1 C4	D1 C14

Outros comentarios sobre a Avaliación

Norma 1: Para supera-la materia é indispensable ter realizado satisfactoriamente as prácticas. Iso require: a) ter asistido a todas as sesións de prácticas ou presentar un certificado que a xuízo dos profesores acredite causa xustificada para faltar a un máximo de 2 sesións; e b) acadar unha puntuación de 4,0 a xuízo do profesor encargado. Se no se cumpren ambos requisitos a calificación global no poderá exceder 4,0 puntos.

Norma 2: Cada examen (sexa parcial ou final) incluíra cuestións teóricas e problemas numéricos. Para supera-lo exame, ademais dunha calificación global de 5,0 puntos, será necesario obter unha puntuación mínima de 4,0 puntos sobre 10 nas cuestións teóricas e de 3,0 puntos sobre 10 nos problemas numéricos. En caso contrario a calificación global do examen nunca poderá ser superior a 4,0 puntos.

Norma 3. Os estudantes que, cumprindo a "norma 2", acaden unha puntuación igual ou superior a 4,2 sobre 10 puntos na proba parcial poderán presentarse ó exame final (en calquera das súas oportunidades) contendo unicamente os exercicios e cuestións relacionadas cos temas non incluídos no examen parcial. Esta opción deberá ser indicada ó profesor ó comenza-lo exame final. Ó aplicar esta opción a calificación global dos exames obterase promediando ambos exames con igual peso.

Norma 4. En caso de verificarse as normas anteriores, a calificación global da materia será a máis alta de: a) a obtida no exame (ou conxunto de exames utilizando as norma 3); e b) a resultante de aplicar la siguiente ponderación: resolución de exercicios 10%, prácticas de laboratorio 10%, conxunto de exames 80%.

Norma 5. En futuras convocatorias os estudantes que superaran as prácticas poderán solicitar un certificado coa calificación obtida nese curso. Este podwá servirles para solicitar a futuros profesores responsables a convalidación das prácticas. Acceder a esa convalidación dependerá, obviamente, da norma que sigan futuros profesores e non queda garantida.

Norma 6. Non se certificará a aprobación dun parcial coa materia suspensa. Non se contempla manter aprobadas partes da asignatura entre cursos académicos diferentes.

Norma 7. Durante o proceso de calificación, o profesorado da asignatura poderá requirir que, en entrevista persoal, o estudante despexe calquera dúbida que afecte a correcta calificación de calquera dos seus exames. Este procedemento aplicarase para casos de ilexibilidade, presunción de copia, e outros problemas nos que o profesorado considere que poden solventarse deste xeito.

Norma 8. A detección polo profesorado da asignatura, o por un vixilante do exame, de calquera tipo de copia supondrá a expulsión do exame e a calificación de cero, que será aplicada nesa oportnidade e nas seguintes dese curso.

Bibliografía. Fontes 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

Recomendacións

Materias que continúan o temario

Química física IV: Estrutura molecular y espectroscopia/V11G201V01307

Materias que se recomienda ter cursado previamente

Física: Física I/V11G201V01102

Física: Física II/V11G201V01107

Matemáticas: Matemáticas I/V11G201V01103

Matemáticas: Matemáticas II/V11G201V01108

Química: Química I/V11G201V01104
