GUIA DOCENTE DE LA ASIGNATURA (∞)

QUÍMICA FÍSICA I

°Curso 2019-2020

(Fecha última actualización: 17/05/2019)
(Fecha de aprobación en Consejo de Departamento: 17/05/2019)

MÓDULO	MATERIA	CURSO	SEMESTRE	CRÉDITOS	TIPO
Química Física	Química Física	2º	1º	6	Obligatorio

PROFESORES[1]	DIRECCIÓN COMPLETA DE CONTACTO PARA TUTORÍAS (Dirección postal, teléfono, correo electrónico, etc.)
• Grupo A: Antonio Cardenete Espinosa • Grupo B: Antonio Parody Morreale e Isabel María Plaza del Pino.	Dpto. Química Física, Facultad de Ciencias (Edificio de Químicas, 1ª Planta). Correo electrónico: acardene@ugr.es; aparody@ugr.es; iplaza@ugr.es.
	HORARIO DE TUTORÍAS Y/O ENLACE A LA PÁGINA WEB DONDE PUEDAN CONSULTARSE LOS HORARIOS DE TUTORÍAS[1]
	• Profesor Antonio Cardenete: http://directorio.ugr.es/static/PersonalUGR/*/show/970dca93830b7575dcb53cdb2095b60c • Profesor Antonio Parody: http://directorio.ugr.es/static/PersonalUGR/*/show/1f845aa369193d6649018d8ae61ccacc • Profesora Isabel Plaza: http://directorio.ugr.es/static/PersonalUGR/*/show/c834267e408681053dd5294ea6bcb912

GRADO EN EL QUE SE IMPARTE	OTROS GRADOS A LOS QUE SE PODRÍA OFERTAR
Grado en Química	Grado en Ingeniería Química Grado en Bioquímica Grado en Física Grado en Ciencias Ambientales Grado en Biotecnología

PRERREQUISITOS Y/O RECOMENDACIONES (si procede)

[1] Consulte posible actualización en Acceso Identificado > Aplicaciones > Ordenación Docente

(∞) Esta guía docente debe ser cumplimentada siguiendo la "Normativa de Evaluación y de Calificación de los estudiantes de la Universidad de Granada" (http://secretariageneral.ugr.es/pages/normativa/fichasugr/ncg7121/!)

Se recomienda haber cursado las materias del Módulo Básico.
Tener conocimientos adecuados sobre:

- Química
- Física
- Matemáticas

BREVE DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS (SEGÚN MEMORIA DE VERIFICACIÓN DEL GRADO)

Introducción a la mecánica cuántica. Aplicación de la mecánica cuántica al estudio de sistemas modelo. Utilización de ordenadores para el estudio de átomos y moléculas.

COMPETENCIAS GENERALES Y ESPECÍFICAS

Competencias Genéricas:

•CG 1: Analizar y sintetizar.
•CG3 Comunicarse de forma oral y escrita en la lengua oficial del Grado
•CG6 Resolver problemas
•CG9 Razonar críticamente
•CG10 Realizar un aprendizaje autónomo para su desarrollo continuo profesional

Competencias Específicas:

•CE 11: Los principios de la mecánica cuántica y su aplicación en la descripción de la estructura y propiedades de átomos y moléculas.
•CE 22: Los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionados con todas las áreas de la Química.
•CE 25: Evaluar e interpretar datos e información Química.
•CE 27: Aplicar conocimientos químicos adquiridos a la resolución de problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente
desarrollados.
•CE 30: Utilizar razonadamente las herramientas matemáticas e informáticas para trabajar con datos químicos.

OBJETIVOS (EXPRESADOS COMO RESULTADOS ESPERABLES DE LA ENSEÑANZA)

Que el alumnado sea capaz de:

- Explicar los conceptos básicos de la Mecánica Cuántica
- Aplicar los conceptos básicos de la Mecánica Cuántica a sistemas sencillos.
- Aplicar los conceptos básicos de la Mecánica Cuántica en la descripción de átomos y moléculas.

TEMARIO DETALLADO DE LA ASIGNATURA

TEMARIO TEÓRICO:

- **Tema 1. Orígenes de la Mecánica Cuántica**
  1. Los fracasos de la Física Clásica.
  2. Dualidad onda partícula.

- **Tema 2. Principios de la Mecánica Cuántica.**
  1. La ecuación de Schrödinger.
  2. La interpretación de Born de la función de onda.

3. Operadores, autovalores y autofunciones. Superposición y valores esperados.
4. Principio de incertidumbre.

- **Tema 3. Aplicaciones de la Mecánica Cuántica.**
  1. Partícula en una caja.
  2. Partícula en una caja de dos y tres dimensiones.
  3. Oscilador armónico.
  4. Propiedades de los osciladores.
  5. Efecto túnel.
  6. Rotación en tres dimensiones: partícula en una esfera/rotor rígido.

- **Tema 4. Estructura atómica I.**
  1. Estructura del átomo de hidrógeno e hidrogenoides.
  2. Orbitales atómicos y sus energías.
  3. Números cuánticos, energía y momento angular.
  4. Orbitales reales.
  5. El espín del electrón.

- **Tema 5. Estructura atómica II.**
  1. Estructuras de átomos multielectrónicos. Aproximación orbital.
  2. Orbitales de campos autoconsistentes.
  3. Espectros de átomos complejos.

- **Tema 6. Estructura molecular.**
  1. Clasificación de interacciones interatómicas.
  2. Principio de variaciones.
  3. Aproximación de Born-Oppenheimer.
  4. Teoría del enlace de valencia.
  5. Teoría de los orbitales moleculares.
  6. Orbitales moleculares para sistemas poliatómicos. Aproximación de Hückel.

TEMARIO PRÁCTICO:

Seminarios:

- Movimiento ondulatorio y ecuaciones diferenciales.
- Radiación del cuerpo negro.
- Modelo de Bohr.
- Espectroscopia atómica.
- Coordenadas polares esféricas.
- Visualización de orbitales atómicos.
- Talleres de cuestiones y problemas.

Prácticas de Laboratorio:

- Espectroscopio-DVD.
- Serie de Balmer.

BIBLIOGRAFÍA FUNDAMENTAL:

- P.W. Atkins y J. de Paula, "Química Física", 8ª edición. Editorial Médica Panamericana, Buenos Aires (2008).
- T. Engel y P. Reid, "Química Física", Pearson Education, Madrid (2006).
- I.N. Levine, "Fisicoquímica", 5ª edición (vol. 1 y 2). McGraw Hill, Madrid (2004).

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA:

- I.N. Levine, "Química Cuántica", 5º edición. Prentice Hall, Madrid (2001).
- D.A. McQuarrie. "Quantum Chemistry". 2ª edición. University Science Books, Sausalito, California (2008).
- J.P. Lowe. "Quantum Chemistry". 3ª edición. Elsevier, Boston (2006).
- J.B. Rusca, V. Branchadell Gallo, M. Moreno Ferrer y M. Sodupe Roure, "Química Cuántica : fundamentos y aplicaciones computacionales", Síntesis, Madrid, (2002).
- R.G. Mortimer, "Mathematics for Physical Chemistry", 4ª edición. Elsevier, San Diego-California (2013). [Recurso electrónico]: http://www.sciencedirect.com/science/book/9780124158092 (Biblioteca UGR)

ENLACES RECOMENDADOS

- http://www.shef.ac.uk/chemistry/orbitron/. "Orbitron". Galería de orbitales atómicos y moleculares. Imágenes y representaciones de varios tipos de orbitales atómicos y moleculares. Animaciones.
- http://chemdex.org/. El directorio Sheffield WWW de Química. Numerosos enlaces a todo tipo de recursos de Química en la red.

METODOLOGÍA DOCENTE

- Clases magistrales.
- Seminarios/Talleres.
- Prácticas de Laboratorio.
- Tutorías.

EVALUACIÓN (INSTRUMENTOS DE EVALUACIÓN, CRITERIOS DE EVALUACIÓN Y PORCENTAJE SOBRE LA CALIFICACIÓN FINAL, ETC.)

CONVOCATORIA ORDINARIA:

- Examen final: 60 % de la calificación final. En el examen se deberá obtener una nota mínima de 4 sobre 10 para considerar las otras actividades de evaluación en la calificación final.
- Seminarios y prácticas: 10 % de la calificación final. La asistencia a los seminarios y prácticas es obligatoria. Para que la nota de este apartado contribuya a la calificación final será necesario realizar TODOS los seminarios y prácticas que se programen.
- Otros ejercicios y actividades: 30 % de la calificación final.

CONVOCATORIA EXTRAORDINARIA:
Examen escrito (100% calificación).

DESCRIPCIÓN DE LAS PRUEBAS QUE FORMARÁN PARTE DE LA EVALUACIÓN ÚNICA FINAL ESTABLECIDA EN LA "NORMATIVA DE EVALUACIÓN Y DE CALIFICACIÓN DE LOS ESTUDIANTES DE LA UNIVERSIDAD DE GRANADA"

- Examen escrito (100% calificación).

INFORMACIÓN ADICIONAL