

QUÍMICA FÍSICA I

MÓDULO	MATERIA	CURSO	SEMESTRE	CRÉDITOS	TIPO
Química Física	Química Física	2º	1º	6	Obligatorio
PROFESORADO			DIRECCIÓN COMPLETA DE CONTACTO PARA TUTORÍAS (Dirección postal, teléfono, correo electrónico, etc.)		
<ul style="list-style-type: none"> 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 <ul style="list-style-type: none"> Profesor Antonio Cardenete : : viernes de 8 a 14 horas. Profesor Antonio Parody: viernes de 8 a 14 horas. Profesora Isabel Plaza: martes de 10 a 14 horas y viernes de 12 a 14 h. 		
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		
PRERREQUISITOS Y/O RECOMENDACIONES (si procede)					
Haber cursado o cursar paralelamente las materias del Módulo Básico. Tener conocimientos adecuados sobre: <ul style="list-style-type: none"> 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:

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

Prácticas de Laboratorio:

Práctica 1. Espectroscopio-DVD.

Práctica 2. Serie de Balmer.

Práctica 3. Espectroscopia de absorción de colorantes conjugados. Partícula en una caja.

BIBLIOGRAFÍA



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", 5ª 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).

ENLACES RECOMENDADOS

- <http://bcs.whfreeman.com/pchem8e/>. Web del libro "Química Física" (Atkins y de Paula, ver bibliografía fundamental).
- <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.

PROGRAMA DE ACTIVIDADES

Primer cuatrimestre	Temas del temario	Actividades presenciales (NOTA: Modificar según la metodología docente propuesta para la asignatura)					Actividades no presenciales (NOTA: Modificar según la metodología docente propuesta para la asignatura)				
		Sesiones teóricas (horas)	Sesiones prácticas (horas)	Exposiciones y seminarios (horas)	Exámenes (horas)	Etc.	Tutorías individuales (horas)	Tutorías colectivas (horas)	Estudio y trabajo individual del alumno (horas)	Trabajo en grupo (horas)	Etc.
Semana 1	1	2		2			1		5		
Semana 2	1-2	2		2			1		5		
Semana 3	2	4					1		5		
Semana 4	2	2	2				1		5		
Semana 5	2	2	1	1			1		5		



Semana 6	3	3		1			1		5		
Semana 7	3	3		1			1		5		
Semana 8	3	2		1			1		5		
Semana 9	4	3		1			1		5		
Semana 10	4	2		1			1		5		
Semana 11	4	2	2				1		5		
Semana 12	5	2		1			1		5		
Semana 13	5	3		1			1		5		
Semana 14	6	2					1		5		
Semana 15	6	3		1			1		5		
Semana 16	6	2					1		5		
Total horas		39	5	13	3		16		80		

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

- Examen final: 60 %.
- Seminarios y prácticas: 10 %.
- Otros ejercicios: 30: %

Para la evaluación única final a la que el alumnado se puede acoger en los casos indicados en la "NORMATIVA DE EVALUACIÓN Y DE CALIFICACIÓN DE LOS ESTUDIANTES DE LA UNIVERSIDAD DE GRANADA" (aprobada por Consejo de Gobierno en su sesión extraordinaria de 20 de mayo de 2013) se realizará un examen (100% calificación final).

INFORMACIÓN ADICIONAL

