

Guía docente de la asignatura

Química Física I (2911122)

Fecha de aprobación: 14/06/2022

Grado	Grado en Química	Rama	Ciencias				
Módulo	Química Física	Materia	Química Física				
Curso	2º	Semestre	1º	Créditos	6	Tipo	Obligatoria

PRERREQUISITOS Y/O RECOMENDACIONES

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 ASOCIADAS A MATERIA/ASIGNATURA**COMPETENCIAS GENERALES**

- CG01 - El alumno deberá adquirir la capacidad de analizar y sintetizar
- CG02 - El alumno deberá adquirir la capacidad de organizar y planificar
- CG03 - El alumno deberá adquirir la capacidad de comunicarse de forma oral y escrita en la lengua oficial del Grado
- CG05 - El alumno deberá adquirir la capacidad de gestionar datos y generar información / conocimiento
- CG08 - El alumno deberá adquirir la capacidad de trabajar en equipo
- CG09 - El alumno deberá adquirir la capacidad de razonar críticamente

COMPETENCIAS ESPECÍFICAS

- CE01 - El alumno deberá saber o conocer los aspectos principales de terminología



- química, nomenclatura, convenios y unidades
- CE03 - El alumno deberá saber o conocer las características de los diferentes estados de la materia y las teorías empleadas para describirlos
 - CE04 - El alumno deberá saber o conocer los tipos principales de reacciones químicas y las principales características asociadas a cada una de ellas
 - CE06 - El alumno deberá saber o conocer los principios de termodinámica y sus aplicaciones en química
 - CE07 - El alumno deberá saber o conocer la cinética del cambio químico, incluyendo catálisis e interpretación mecanicista de las reacciones químicas
 - CE11 - El alumno deberá saber o conocer los principios de la mecánica cuántica y su aplicación en la descripción de la estructura y propiedades de átomos y moléculas
 - CE13 - El alumno deberá saber o conocer la relación entre propiedades macroscópicas y propiedades de átomos y moléculas individuales: incluyendo macromoléculas, polímeros, coloides y otros materiales
 - CE22 - El alumno deberá saber o conocer los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionados con todas las áreas de la Química
 - CE25 - El alumno deberá saber hacer o tener la capacidad de evaluar e interpretar datos e información Química
 - CE27 - El alumno deberá saber hacer o tener la capacidad de aplicar conocimientos químicos adquiridos a la resolución de problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados
 - CE29 - El alumno deberá saber hacer o tener la capacidad de presentar, tanto de forma escrita como oral, material y argumentación científica a una audiencia especializada
 - CE30 - El alumno deberá saber hacer o tener la capacidad de utilizar razonadamente las herramientas matemáticas e informáticas para trabajar con datos químicos
 - CE46 - El alumno deberá saber o conocer los fundamentos o principios de otras disciplinas necesarios para las distintas áreas de la Química.

RESULTADOS DE APRENDIZAJE (Objetivos)

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.

PROGRAMA DE CONTENIDOS TEÓRICOS Y PRÁCTICOS

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.

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

BIBLIOGRAFÍA FUNDAMENTAL

- P.W. Atkins y J. de Paula, “Química Física”, 8ª edición. Editorial Médica Panamericana, Buenos Aires(2008).
<https://www.medicapanamericana.com/VisorEbookV2/Ebook/9789500694988#{%22Pagina%22:%222245%22,%22Vista%22:%22Indice%22,%22Busqueda%22:%22%22}>
- 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]:
<https://ebookcentral.proquest.com/lib/ugr/detail.action?docID=1211755> (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.
- <http://www.ingebook.com> desde Biblioteca UGR. Se puede acceder a numerosos libros de todas las materias.
- Plataforma docente PRADO: <https://prado.ugr.es>, donde se puede encontrar toda la información y materiales de la asignatura.

METODOLOGÍA DOCENTE

- MD01 – Lección magistral/expositiva.
- MD02 – Resolución de problemas y estudios de casos prácticos.
- MD03 – Prácticas de laboratorio.
- MD06 – Seminarios.
- MD08 – Realización de trabajos en grupo.
- MD09 – Realización de trabajos individuales.

EVALUACIÓN (instrumentos de evaluación, criterios de evaluación y porcentaje sobre la calificación final)



EVALUACIÓN ORDINARIA

- Examen final escrito: 60 % de 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.

Para aprobar la asignatura será necesario que la nota obtenida en el examen final sea superior a 4 puntos sobre 10. Si no se supera este umbral la asignatura estará suspensa y la calificación final será la media ponderada del examen final (60%), seminarios y prácticas (10%) y otros ejercicios y actividades (30%) hasta un máximo de 4 puntos sobre 10.

EVALUACIÓN EXTRAORDINARIA

Examen de todos los contenidos de la asignatura (100% calificación).

EVALUACIÓN ÚNICA FINAL

Examen de todos los contenidos de la asignatura (100% calificación).

