

Fecha de aprobación: 26/06/2024

Guía docente de la asignatura

Química Física I (2911122)

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. Introducción a la Mecánica Cuántica.

- Cuantización de la Energía.
- Dualidad onda partícula.
- Principio de incertidumbre

Tema 2. Principios de la Mecánica Cuántica.

- Postulados de la Mecánica Cuántica.
- La función de onda.
- Operadores, autovalores y autofunciones. Superposición de estados y valores esperados.
- La ecuación de Schrödinger.

Tema 3. Mecánica cuántica de sistemas elementales.

- Partícula libre.
- Partícula en una caja monodimensional.



- Partícula en una caja tridimensional.
- Oscilador armónico unidimensional.
- El problema de dos partículas. Coordenadas internas.
- Vibraciones moleculares.
- Movimiento de rotación. Coordenadas esféricas.
- Rotor rígido de dos partículas. Rotación de moléculas diatómicas.

Tema 4. Átomos hidrogenoides.

- Ecuación de Schrödinger de un hidrogenoide. La ecuación radial. Niveles de energía.
- Orbitales. Orbitales reales.
- Números cuánticos, energía y momento angular.
- Espín del electrón.

Tema 5. Átomos polieletrónicos. Métodos aproximados.

- Átomo de helio. Métodos aproximados.
- Teorema de variaciones. Aproximación orbital.
- Principio de Pauli.
- Átomos multieletrónicos.
- Orbitales de Hartree-Fock. Método del campo autoconsistente.
- Momento angular orbital y de espín.
- Acoplamiento espín-órbita. Momento angular total.
- Espectros atómicos.

Tema 6. Estructura molecular. Moléculas diatómicas.

- La molécula-ión de hidrógeno. La aproximación de Born-Oppenheimer.
- Teoría de orbitales moleculares CLOA.
- Otros orbitales moleculares.
- Moléculas diatómicas homonucleares con más de un electrón.
- Moléculas diatómicas heteronucleares.
- Funciones de onda SCF y de Hartree-Fock para moléculas diatómicas.

Tema 7. Estructura molecular. Moléculas poliatómicas.

- Moléculas lineales.
- Moléculas no lineales
- El método de Hückel.
- Cálculo de propiedades moleculares.

PRÁCTICO

Talleres:

- Movimiento ondulatorio y ecuaciones diferenciales.
- Radiación del cuerpo negro.
- Modelo de Bohr.

Seminarios: estudios de casos relacionados con la asignatura

Prácticas de Laboratorio:

- Espectroscopio-DVD.
- Serie de Balmer.

BIBLIOGRAFÍA

BIBLIOGRAFÍA FUNDAMENTAL

- I.N. Levine, "Fisicoquímica", 5ª edición (vol. 1 y 2). McGraw Hill, Madrid (2004).
- 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:%22245%22,%22Vista%22:%22Indice%22,%22Busqueda%22:%22%22}>

- T. Engel y P. Reid, “Química Física”, Pearson Education, Madrid (2006).

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

- I.N. Levine, “Química Cuántica”, 5^o edición. Prentice Hall, Madrid (2001).
- D.A. McQuarrie. “Quantum Chemistry”. 2^a edición. University Science Books, Sausalito, California (2008).
- J.P. Lowe. “Quantum Chemistry”. 3^a 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”, 4^a 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: 70 % de la calificación final.
- Talleres y prácticas: 10 % de la calificación final. Para que la nota de este apartado contribuya a la calificación final será necesario realizar TODOS los talleres y prácticas que se programen.
- Otros ejercicios y actividades: 20 % de la calificación final.



Para poder superar la asignatura será necesario cumplir dos condiciones:

- La calificación media ponderada de los 3 ítems ha de ser igual o superior a 5 puntos sobre 10.
- En el examen final se deberá obtener una calificación mínima de 5 puntos sobre 10. En el caso en el que no se cumpla esta condición, la asignatura estará suspensa y la calificación final será la media ponderada de los tres ítems hasta un máximo de 4 puntos sobre 10.

Consideración de NO PRESENTADO: se adoptará el criterio en el artículo 22 de la Normativa de Evaluación y Calificación de la Universidad de Granada.

EVALUACIÓN EXTRAORDINARIA

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

El sistema de calificaciones se expresará mediante calificación numérica de acuerdo con lo establecido en el art. 5 del R. D 1125/2003, de 5 de septiembre, por el que se establece el sistema europeo de créditos y el sistema de calificaciones en las titulaciones universitarias de carácter oficial y validez en el territorio nacional. de todos los contenidos de la asignatura (100% calificación).

EVALUACIÓN ÚNICA FINAL

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

- Se contempla también la realización de una evaluación única final a la que podrán acogerse aquellos estudiantes que no puedan cumplir con el método de evaluación continua por motivos laborales, estado de salud, discapacidad o cualquier otra causa debidamente justificada que les impida seguir el régimen de evaluación continua.
- Esta evaluación final **constará de una única prueba** en la que se valorarán las competencias desarrolladas en la asignatura. Los contenidos a evaluar corresponderán al temario detallado de la asignatura.
- Para acogerse a la evaluación única final, el estudiante, en **las dos primeras semanas de impartición de la asignatura**, lo solicitará a la Directora del Departamento, quienes darán traslado al profesorado correspondiente, alegando y acreditando las razones que le asisten para no poder seguir el sistema de evaluación continua. Transcurridos diez días sin que el estudiante haya recibido respuesta expresa y por escrito del Director del Departamento se entenderá que ésta ha sido desestimada. En caso de denegación, el estudiante podrá interponer, en el plazo de un mes, recurso de alzada ante el Rector, quién podrá delegar en el Decano o Director del Centro, agotando la vía administrativa.
- No obstante lo anterior, por causas excepcionales sobrevenidas y justificadas (motivos laborales, estado de salud, Discapacidad, programas de movilidad, representación o cualquier otra circunstancia análoga), podrá solicitarse la evaluación única final fuera de los citados plazos, bajo el mismo procedimiento administrativo.

INFORMACIÓN ADICIONAL

Información de interés para estudiantado con discapacidad y/o Necesidades Específicas de Apoyo Educativo (NEAE): [Gestión de servicios y apoyos \(https://ve.ugr.es/servicios/atencion-social/estudiantes-con-discapacidad\)](https://ve.ugr.es/servicios/atencion-social/estudiantes-con-discapacidad).

