



Guía Docente				
Datos Identificativos				2013/14
Asignatura (*)	Química Física 1	Código	610G01016	
Titulación	Grao en Química			
Descritores				
Ciclo	Período	Curso	Tipo	Créditos
Grao	1º cuatrimestre	Segundo	Obrigatoria	6
Idioma	Castelán/Inglés			
Prerrequisitos				
Departamento	Química Física e Enxeñaría Química 1			
Coordinación	Rodríguez Barro, Pilar	Correo electrónico	pilar.rbarro@udc.es	
Profesorado	García Dopico, María Victoria Rodríguez Barro, Pilar Vilariño Barreiro, María Teresa	Correo electrónico	victoria.gdopico@udc.es pilar.rbarro@udc.es teresa.vilarino@udc.es	
Web				
Descrición xeral	<p>La Química Física se dedica al estudio de los principios físicos fundamentales que gobiernan las propiedades y el comportamiento de los sistemas químicos. Un sistema químico puede estudiarse desde un punto de vista microscópico o macroscópico. En este primer curso de Química Física se introduce la metodología del estudio microscópico de los átomos y las moléculas (Química Cuántica) y la metodología que permite calcular propiedades macroscópicas de los sistemas en equilibrio a partir de propiedades moleculares (Termodinámica Estadística).</p> <p>Los contenidos que se imparten en esta asignatura constituyen los fundamentos teóricos imprescindibles para la asignatura de Química Física 2 y un marco de referencia para las demás ramas de la Química que, necesariamente, aplican buena parte de los conceptos estudiados en esta asignatura en el desarrollo de sus programas específicos.</p> <p>-----</p> <p>This course deals with the microscopic behavior of matter. It presents an introduction to quantum mechanics and statistical thermodynamics. The course begins with an examination of the key concepts, the basic principles and the formulation of quantum theory and applications to simple systems ? the particle in a box, the harmonic oscillator, the rigid rotor and the hydrogen atom. It continues with a discussion of atomic structure and atomic spectra. The final lectures on quantum chemistry cover applications to chemical bonding including valence bond and molecular orbital theory and molecular structure.</p> <p>The last part of the course covers elementary statistical mechanics that allows one to study the methodology to calculate macroscopic properties of equilibrium systems from molecular properties.</p>			

Competencias da titulación	
Código	Competencias da titulación
A1	Utilizar a terminoloxía química, nomenclatura, convenios e unidades.
A8	Coñecer os principios da Mecánica Cuántica e a súa aplicación á estrutura de átomos e moléculas.
A12	Relacionar as propiedades macroscópicas coas de átomos e moléculas.
A14	Demostrar o coñecemento e comprensión de conceptos, principios e teorías relacionadas coa Química.
A15	Recoñecer e analizar novos problemas e planear estratexias para solucionarlos.
A16	Adquirir, avaliar e utilizar os datos e información bibliográfica e técnica relacionada coa Química.
A20	Interpretar os datos procedentes de observacións e medidas no laboratorio.
A21	Comprender os aspectos cualitativos e cuantitativos dos problemas químicos.
A22	Planificar, deseñar e desenvolver proxectos e experimentos.
A24	Explicar, de xeito comprensible, fenómenos e procesos relacionados coa Química.
A25	Relacionar a Química con outras disciplinas e recoñecer e valorar os procesos químicos na vida diaria.
B1	Aprender a aprender.
B2	Resolver problemas de forma efectiva.
B3	Aplicar un pensamento crítico, lóxico e creativo.
B4	Traballar de forma autónoma con iniciativa.
B5	Traballar de forma colaborativa.



B7	Comunicarse de maneira efectiva nun entorno de traballo.
C1	Expresarse correctamente, tanto de forma oral coma escrita, nas linguas oficiais da comunidade autónoma.
C2	Dominar a expresión e a comprensión de forma oral e escrita dun idioma estranxeiro.
C3	Utilizar as ferramentas básicas das tecnoloxías da información e as comunicacións (TIC) necesarias para o exercicio da súa profesión e para a aprendizaxe ao longo da súa vida.
C6	Valorar criticamente o coñecemento, a tecnoloxía e a información dispoñible para resolver os problemas cos que deben afrontarse.
C7	Asumir como profesional e cidadán a importancia da aprendizaxe ao longo da vida.
C8	Valorar a importancia que ten a investigación, a innovación e o desenvolvemento tecnolóxico no avance socioeconómico e cultural da sociedade.

Resultados da aprendizaxe			
Competencias de materia (Resultados de aprendizaxe)	Competencias da titulación		
Conocer los principios de la Química Cuántica	A1	B1	C3
	A8	B2	C6
	A14	B3	C8
	A15	B4	
	A16	B5	
	A20		
Conocer los principios de la Termodinámica Estadística	A1	B1	C3
	A12	B2	C6
	A14	B3	C8
	A16	B4	
	A20	B5	
Resolver nuevos problemas relacionados con los contenidos desarrollados.	A1	B1	C1
	A14	B2	C3
	A15	B3	
	A16	B4	
	A20	B7	
	A21		
Destreza en la búsqueda bibliográfica de aplicaciones reales y de investigación sobre los contenidos de la materia.	A14	B1	C1
	A15	B3	C2
	A16	B4	C3
	A20	B7	C6
	A21		C7
	A22		C8
	A24		
A25			

Contidos	
Temas	Subtemas
QUÍMICA CUÁNTICA	



1. Postulados de la Mecánica Cuántica	<ul style="list-style-type: none"><li>- Primer postulado: estado de un sistema cuántico.</li></ul> Función de onda: significado físico. Normalización y ortogonalidad. <ul style="list-style-type: none"><li>- Segundo postulado: operador asociado a toda variable observable.</li></ul> Álgebra de operadores. Operador energía: hamiltoniano. <ul style="list-style-type: none"><li>- Tercer postulado: ecuación de valores propios.</li></ul> Función propia y valor propio de un operador. Operadores hermíticos. <ul style="list-style-type: none"><li>- Cuarto postulado: valor medio de una propiedad (valor esperado).</li><li>- Quinto postulado: evolución temporal del estado de un sistema cuántico. Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo.</li></ul> <ul style="list-style-type: none"><li>- Conmutabilidad</li></ul>
2. Movimiento traslacional: la partícula en una caja	La partícula en una caja monodimensional: Funciones de onda y niveles de energía. <ul style="list-style-type: none"><li>- La partícula en una caja bidimensional: Separación de variables y degeneración.</li><li>- La partícula en una caja tridimensional</li></ul>
3. Movimiento vibracional: el oscilador armónico	Descripción clásica. <ul style="list-style-type: none"><li>- Tratamiento cuántico.</li></ul> Funciones de onda: Polinomios de Hermite. Simetría de las funciones de onda. Energía de vibración: niveles energéticos. <ul style="list-style-type: none"><li>- El oscilador armónico como modelo de vibración de moléculas.</li><li>- Anarmonicidad.</li></ul>
4. Movimiento rotacional: el rotor rígido	<ul style="list-style-type: none"><li>- Descomposición del movimiento de dos partículas.</li><li>- Tratamiento cuántico.</li></ul> Coordenadas esféricas. Movimiento de una partícula en un anillo. Funciones de onda: Polinomios de Legendre. Armónicos esféricos. Energía de rotación: niveles energéticos. <ul style="list-style-type: none"><li>- Cuantización del momento angular: Cuantización del módulo y del plano de giro.</li></ul>
5. Átomos hidrogenoides	Hamiltoniano y resolución de la ecuación de Schrodinger. Unidades atómicas. Funciones de onda radial y angular. Niveles energéticos. <ul style="list-style-type: none"><li>- Función de onda (orbital atómico) y función de distribución radial.</li><li>- Funciones de onda reales: representación radial y angular.</li><li>- Efecto Zeeman</li></ul>
6. Métodos aproximados	<ul style="list-style-type: none"><li>- Método de perturbaciones.</li><li>- Método de variaciones.</li></ul> Teorema variacional. Función de prueba. <ul style="list-style-type: none"><li>- Funciones variacionales lineales: ecuaciones seculares.</li></ul>
7. Many-electron atoms.	<ul style="list-style-type: none"><li>- Helium atom.</li><li>- Spin angular moment.</li><li>- Indistinguishability of electrons: Pauli exclusion principle.</li><li>- Periodic Table.</li></ul>



8. Espectroscopía atómica	Configuración electrónica: niveles energéticos. - Momento angular orbital total: acoplamiento spin-orbita y acoplamiento j-j. - Términos atómicos. Reglas de Hund. Reglas de selección.
9. El enlace químico: el ión molecula de hidrógeno.	- La aproximación de Born-Oppenheimer. - Método de orbitales moleculares y de enlace de valencia. - Aplicación del método de orbitales moleculares al ion molécula de hidrógeno: H <sub>2</sub> <sup>+</sup> . Integral de solapamiento. Orbitales moleculares: enlazante y antienlazante.
10. Moléculas diatómicas	- Consideraciones generales para la formación de enlace. - Moléculas diatómicas homonucleares. - Moléculas diatómicas heteronucleares. Enlace polar: electronegatividad.
11. Moléculas conjugadas y aromáticas	- Métodos semiempíricos. - Aproximación pi-electrónica. - Método del electrón libre (FEMO). - Método de orbitales moleculares: aproximación Hückel. Energía de resonancia o deslocalización. Índices de reactividad. Orden de enlace pi. Método alternativo para monociclos y moléculas lineales.
<b>TERMODINÁMICA ESTADÍSTICA</b>	
12. Introducción a la termodinámica estadística	- Fundamentos del método mecano-estadístico. - Bases de la termodinámica estadística. - Estudio termodinámico estadístico de gases ideales. - Interpretación estadística de las propiedades termodinámicas de los sólidos.

Planificación			
Metodoloxías / probas	Horas presenciais	Horas non presenciais / traballo autónomo	Horas totais
Sesión maxistral	29	58	87
Seminario	10	25	35
Prácticas de laboratorio	10	3	13
Traballos tutelados	0	10	10
Proba obxectiva	1	0	1
Proba mixta	3	0	3
Atención personalizada	1	0	1

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

Metodoloxías	
Metodoloxías	Descrición
Sesión maxistral	Desarrollo de los contenidos de la materia.



Seminario	<p>Actividad a desarrollar en grupos reducidos.</p> <p>Se resolverán cuestiones y problemas relacionados con los contenidos de las sesiones magistrales, con apoyo y supervisión directa del profesor.</p> <p>Previamente a la sesión presencial, a través de la plataforma virtual, se indicará al alumno las actividades a realizar antes y durante cada sesión.</p>
Prácticas de laboratorio	<p>Prácticas de laboratorio de informática.</p> <p>Se propondrán y resolverán problemas prácticos relacionados con los contenidos de Química Cuántica, mediante el uso de programas informáticos de uso habitual en cálculos científicos.</p> <p>A través de la plataforma virtual de la asignatura se comunicarán fechas y horarios y composición de los grupos prácticos.</p>
Trabajos tutelados	<p>Se propondrán varias actividades de resolución de problemas relacionados con los contenidos de las sesiones magistrales y los seminarios, con apoyo y supervisión directa del profesor.</p> <p>Los alumnos tendrán que realizar las actividades en grupos de 2-3 alumnos.</p> <p>Las actividades se propondrán a través de la facultad virtual, tendrán un tiempo limitado de realización y deberán explicarse al profesor en una tutoría presencial en la que serán evaluadas.</p>
Prueba obxectiva	<p>Prueba escrita corta realizada en horario de clase a mediados del cuatrimestre.</p> <p>Se evaluará el aprendizaje asociado a los fundamentos de Química Cuántica y su aplicación a sistemas sencillos.</p>
Prueba mixta	<p>Se evaluará el aprendizaje asociado a todos los contenidos desarrollados durante el cuatrimestre. Prueba escrita realizada al final del cuatrimestre y en segunda oportunidad en Julio.</p> <p>Prueba con dos partes diferenciadas, una que incluye preguntas tipo test o de respuesta breve y otra de resolución de problemas.</p> <p>FECHA: Primera Oportunidad: en el calendario acordado por la Junta de Facultad Segunda Oportunidad: en el calendario acordado por la Junta de Facultad</p>

### Atención personalizada

Metodoloxías	Descrición
Trabajos tutelados	<p>Cada grupo de alumnos deberá concertar una tutoría con el profesor para explicar las actividades no presenciales propuestas a través de la facultad virtual.</p> <p>Además, se recomienda a los alumnos el uso de tutorías individualizadas para resolver todas las dudas, cuestiones y conceptos que no hayan quedado claros referentes tanto a las sesiones magistrales como a los seminarios y trabajos tutelados.</p> <p>Las tutorías se fijarán mediante correo electrónico.</p>

### Avaliación

Metodoloxías	Descrición	Cualificación



Proba obxectiva	Se evaluará el aprendizaje asociado a los fundamentos de Química Cuántica y su aplicación a sistemas sencillos. Incluirá cuestiones cortas.	15
Proba mixta	Se evaluará el aprendizaje asociado a todos los contenidos desarrollados durante el cuatrimestre.  Prueba con dos partes diferenciadas, una que incluye preguntas tipo test o de respuesta breve (50%) y otra de desarrollo y resolución de problemas (50%).	70
Prácticas de laboratorio	Se evaluará la capacidad para resolver los problemas prácticos propuestos, relacionados con los contenidos de Química Cuántica.	10
Trabajos tutelados	Se evaluará el trabajo en grupo de realización de las actividades no presenciales propuestas a través de la facultad virtual.	5

### Observacións avaliación

- La prueba mixta final se realizará en las fechas oficiales aprobadas en Junta de Facultad.
- Para poder realizar las prácticas de la asignatura es necesario la asistencia regular a las clases magistrales y a los seminarios en grupos pequeños, así como haber realizado la prueba mixta de mediados del cuatrimestre. Aquellos alumnos que ya hayan cursado la asignatura en años anteriores deben realizar las prácticas así como cualquier otra actividad que se proponga para el aprendizaje de la materia.
- Para que se tengan en cuenta el resto de actividades que contribuyen a la evaluación será preciso obtener en la prueba mixta final una nota no inferior a 4 (sobre un máximo de 10), siendo necesario obtener una calificación mínima de 2 (sobre 10) en cada una de las partes de dicha prueba. Además ha de obtenerse una nota mínima de 4 sobre 10 en la cuestión correspondiente a Termodinámica Estadística.
- Para que se tengan en cuenta en la calificación final el resto de actividades sujetas a evaluación es preciso obtener una calificación mínima de 3.5 en cada una de ellas (sobre un máximo de 10), siendo requisito imprescindible haber realizado las prácticas.
- Se considerará aprobada la asignatura cuando la calificación final sea igual o superior a 5 (sobre un máximo de 10). De no alcanzar la calificación mínima de 4 en la prueba mixta, la asignatura figurará como suspensa.
- Para que se tengan en cuenta las calificaciones en las distintas actividades sujetas a evaluación es preciso obtener la calificación mínima indicada anteriormente para cada una de ellas. Por tanto, de no alcanzarse dicha puntuación mínima en alguna de ellas, en el caso de que la media sea superior o igual a 5 (sobre 10) la asignatura figurará como suspensa (4.5).

### Fontes de información

<b>Bibliografía básica</b>	<ul style="list-style-type: none"><li>- LEVINE, I.N. (2004). FISICOQUÍMICA 5ª ed. McGraw-Hill</li><li>- ATKINS, P.W. (2010). PHYSICAL CHEMISTRY. Oxford</li><li>- ENGEL, T REID, P. (2010). PHYSICAL CHEMISTRY. Pearson Education</li><li>- McQUARRIE (1997). PHYSICAL CHEMISTRY. University Science Books</li><li>- ATKINS, P.W. (2008). QUÍMICA FÍSICA. Panamericana</li><li>- ENGEL, T; REID, P. (2006). QUÍMICA FÍSICA. Pearson Addison Wesley</li></ul>
<b>Bibliografía complementaria</b>	<ul style="list-style-type: none"><li>- <a href="http://www.m-w.com">http://www.m-w.com</a> (). DICCIONARIO DE INGLÉS ONLINE (Merriam Webster).</li><li>- Página Web de ISI Web of Knowledge (). <a href="http://isi02.isiknowledge.com/">http://isi02.isiknowledge.com/</a>.</li><li>- Página Web del Curso de Química Cuántica del Instituto Tecnológico de Massachusetts MIT (en inglés) (). <a href="http://ocw.mit.edu/courses/chemistry/5-61-physical-chemistry-fall-2007/">http://ocw.mit.edu/courses/chemistry/5-61-physical-chemistry-fall-2007/</a>.</li><li>- Publicaciones de la American Chemical Society (). <a href="http://pubs.acs.org/about.html">http://pubs.acs.org/about.html</a>.</li><li>- Science Direct (). <a href="http://www.sciencedirect.com">http://www.sciencedirect.com</a>.</li><li>- RAFF, L.M. (2001). PRINCIPLES OF PHYSICAL CHEMISTRY. Prentice Hall</li><li>- HERNANDO, J. M. (1974). PROBLEMAS DE QUÍMICA FÍSICA. Gráficas Andrés Martín</li><li>- McQUARRIE (2008). QUANTUM CHEMISTRY. University Science Books</li><li>- LOWE (2006). QUANTUM CHEMISTRY 3ª Ed.. Elsevier</li><li>- LEVINE, I.N. (2001). QUIMICA CUÁNTICA 5ª ed. Prentice Hall</li><li>- DÍAZ PEÑA, M. ROIG MUNTANER, A. (1988). QUÍMICA FÍSICA. Alhambra</li></ul>



## Recomendacións

### Materias que se recomenda ter cursado previamente

Química Física 2/610G01017

### Materias que se recomenda cursar simultaneamente

### Materias que continúan o temario

Matemáticas 1/610G01001

Matemáticas 2/610G01002

Física 1/610G01003

Física 2/610G01004

Química 1/610G01007

Química 2/610G01008

### Observacións

(\*)A Guía docente é o documento onde se visualiza a proposta académica da UDC. Este documento é público e non se pode modificar, salvo casos excepcionais baixo a revisión do órgano competente dacordo coa normativa vixente que establece o proceso de elaboración de guías