



| Guía Docente | | | | |
|-----------------------|--|--------------------|---|----------|
| Datos Identificativos | | | 2014/15 | |
| Asignatura (*) | Química Física 1 | Código | 610G01016 | |
| Titulación | | | | |
| Descritores | | | | |
| Ciclo | Período | Curso | Tipo | Créditos |
| Grao | 1º cuatrimestre | Segundo | Obrigatoria | 6 |
| Idioma | CastelánInglés | | | |
| Prerrequisitos | | | | |
| Departamento | Química Física e Enxeñaría Química 1 | | | |
| Coordinación | Rodríguez Barro, Pilar | Correo electrónico | pilar.rbarro@udc.es | |
| Profesorado | Rodríguez Barro, Pilar Vilariño Barreiro, Maria Teresa | Correo electrónico | pilar.rbarro@udc.es teresa.vilarino@udc.es | |
| Web | | | | |
| Descrición xeral | <p>A Química Física adicase ao estudo dos principios físicos fundamentais que gobernan as propiedades e o comportamento dos sistemas químicos. Un sistema químico pode ser estudado dende un punto de vista microscópico ou macroscópico. Neste primeiro curso de Química Física introdúcese a metodoloxía do estudo microscópico dos átomos e as moléculas (Química Cuántica) e a metodoloxía que permite calcular propiedades macroscópicas dos sistemas en equilibrio a partires de propiedades moleculares (Termodinámica Estadística).</p> <p>Os contidos que se imparten nesta materia constituen os fundamentos teóricos imprescindibles para a materia de Química Física 2 e un marco de referencia para as demais ramas da Química que necesariamente aplican boa parte dos conceptos estudados nesta materia ao desenvolvemento dos seus programas específicos.</p> <p>-----</p> <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. 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> <p>(English lecturer: Teresa Vilariño)</p> | | | |

| Competencias da titulación | |
|----------------------------|----------------------------|
| Código | Competencias da titulación |

| Resultados da aprendizaxe | |
|---|----------------------------|
| Competencias de materia (Resultados de aprendizaxe) | Competencias da titulación |



| | | | |
|---|--------------------------------|----------|----------|
| Coñecer os principios da Química Cuántica | A1 A8 A14 A15 A16 | B2 B5 | C3 |
| Coñecer os principios da Termodinámica Estadística | A1 A12 A14 A16 | B2 B5 | C3 |
| Resolver novos problemas relacionados cos contidos desenvolvidos. | A1 A14 A15 A16 A21 | B2 B5 | C1 C3 |
| Habilidade no manexo e a busca de bibliografía relacionada cos contidos da materia. | A14 A15 A16 A21 | B3 | C1 C3 |
| Habilidade no emprego de ferramentas informáticas para a resolución de problemas. | A8 A15 | B2 B3 | C3 |

| Contidos | |
|---|--|
| Temas | Subtemas |
| QUÍMICA CUÁNTICA | |
| 1. Postulados da Mecánica Cuántica. | <ul style="list-style-type: none"> - Primeiro postulado: o estado dun sistema cuántico. - Segundo postulado: operador asociado a calquera variable observable. - Terceiro postulado: ecuación de autovalores. - Cuarto postulado: o valor medio dunha propiedade. - Quinto postulado: evolución temporal do estado dun sistema cuántico. Ecuación de Schrödinger dependente do tempo. - Conmutabilidade. |
| 2. Movemento traslacional: a partícula nunha caixa. | <ul style="list-style-type: none"> - A partícula nunha caixa unidimensional: funcións de onda e niveis de enerxía. - A partícula nunha caixa bidimensional: separación de variables e dexeneración. - A partícula nunha caixa tridimensional. |
| 3. Movemento vibracional: o oscilador armónico. | <ul style="list-style-type: none"> - Funcións de onda: polinomios de Hermite. - Enerxía de vibración: niveis de enerxía. - O oscilador harmónico como un modelo de vibración de moléculas. - Anarmonicidade. |
| 4. Movemento de rotación: o rotor rixido. | <ul style="list-style-type: none"> - Movemento dunha partícula nun anel. - Funcións de onda: polinomios de Legendre. Harmónicos esféricos. - Enerxía de rotación: niveis enerxéticos. - Cuantización do momento angular. |
| 5. Átomos hidroxenoides. | <ul style="list-style-type: none"> - Formulación e resolución da ecuación de Schrödinger. - Funcións de onda radial e angular. - Niveis de enerxía. - Orbital atómico. - Función de distribución radial. - Funcións de onda real: representación radial e angular. - Efecto Zeeman |



| | |
|---|---|
| 6. Métodos aproximados. | <ul style="list-style-type: none"> - Método de perturbacións. - Método de variacións: teorema variacional. - Funcións variacionais lineais: ecuacións seculares. |
| 7- Átomos polielectrónicos. | <ul style="list-style-type: none"> - Átomo de helio. - O momento angular de spin. - O principio de exclusión de Pauli. - Táboa Periódica. |
| 8. Espectroscopía atómica. | <ul style="list-style-type: none"> - Configuración electrónica: os niveis de enerxía. - Momento angular orbital total: acoplamento spin-órbita e acoplamento j-j. - Termos atómicos. Regras de Hund. Regras de selección. |
| 9. O enlace químico. O ión-molécula de hidróxeno. | <ul style="list-style-type: none"> - Aproximación de Born-Oppenheimer. - Teoría de orbitais moleculares e teoría do enlace de valencia. - Aplicación do método de orbitais moleculares para o ión-molécula de hidróxeno. - Orbitais moleculares: enlazantes y antienlazantes. |
| 10. Moléculas diatómicas. | <ul style="list-style-type: none"> - Consideracións xerais sobre a formación do enlace. - Moléculas diatómicas homonucleares. - Moléculas diatómicas heteronucleares. - Enlace polar: electronegatividade. |
| 11. Moléculas conxugadas e aromáticas. | <ul style="list-style-type: none"> - Os métodos semiempíricos. - Aproximación pi-electrón. - Método do electrón libre (FEMO). - Teoría de orbitais moleculares aplicada as moléculas conxugadas e aromáticas: aproximación Hückel. |
| TERMODINÁMICA ESTADÍSTICA | |
| 12. Introducción a termodinámica estatística. | <ul style="list-style-type: none"> - Fundamentos do método mecánico-estadístico. - Bases da Termodinámica Estatística. - Estudo termodinámico estatístico de gases ideais. - Interpretación estatística das propiedades termodinámicas dos 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 | Explicacións orais complementadas co uso de medios audiovisuais e a introdución de algunhas preguntas dirixidas aos estudantes, coa finalidade de desenvolver os contidos básicos da materia e facilitar a súa aprendizaxe. |



| | |
|--------------------------|--|
| Seminario | <p>Actividade a desenvolver en grupos reducidos.</p> <p>Estudo intensivo dos contidos desenvolvidos nas sesións maxistras.</p> <p>Discúntense e resolvense cuestións e problemas relacionados cos contidos das materia, con apoio e supervisión directa do profesor.</p> <p>Previamente á sesión presencial, a través da plataforma virtual, indícanse as actividades a realizar antes e durante cada sesión.</p> |
| Prácticas de laboratorio | <p>Actividade práctica a desenvolver en grupos reducidos nos laboratorios de informática.</p> <p>Propóñense e resolvense cuantitativa ou cualitativamente problemas relacionados cos contidos da Química Cuántica.</p> <p>Empréganse programas informáticos de uso habitual en cálculos científicos.</p> <p>A través da plataforma virtual da materia comunícanse datas, horarios e composición dos grupos prácticos.</p> |
| Traballos tutelados | <p>Actividades non presenciais a realizar en grupo (2-3 persoas).</p> <p>O alumnado deberá realizar dúas actividades relacionadas con algúns dos contidos do programa.</p> <p>As actividades serán propostas polos profesores a través da plataforma virtual; os alumnos deben realizalas en grupo dentro do prazo establecido previamente; o resultado final debe entregarse por escrito e, posteriormente, debe presentarse oralmente ao profesor nunha titoría presencial.</p> <p>Estas actividades pretenden promover a aprendizaxe autónoma dos estudantes, baixo a tutela do profesor.</p> |
| Proba obxectiva | <p>Proba escrita curta realizada no horario de clase a mediados do cuadrimestre.</p> <p>A proba poderá combinar preguntas de resposta múltiple ou de resposta breve.</p> <p>Avalíase a aprendizaxe asociada aos contidos iniciais desenvolvidos na materia: os fundamentos básicos de Química Cuántica e a súa aplicación a sistemas sinxelos.</p> <p>Nunha sesión presencial posterior, resólvense e discúntense as solucións correctas da proba, de modo que o alumno recibe retroalimentación de como está a ser o seu aproveitamento do curso.</p> |
| Proba mixta | <p>Proba escrita final que combina preguntas de resposta múltiple ou de resposta breve con preguntas de resolución de problemas.</p> <p>Avalíase a aprendizaxe asociada a todos os contidos desenvolvidos na materia.</p> <p>Realízase nas datas aprobadas pola Xunta de Facultade do Centro.</p> |

Atención personalizada

| Metodoloxías | Descrición |
|---------------------|--|
| Traballos tutelados | <p>Cada grupo de estudantes deberá concertar unha titoría presencial co profesor correspondente para discutir as actividades non presenciais propostas.</p> <p>Ademais, recoméndase aos alumnos o uso de titorías individualizadas para resolver todas as dúbidas, cuestións e conceptos que non quedasen claros referentes tanto ás sesións maxistras coma aos seminarios e traballos tutelados.</p> <p>As sesións de titorías concertaranse mediante correo electrónico.</p> |

Avaliación

| Metodoloxías | Descrición | Cualificación |
|-----------------|--|---------------|
| Proba obxectiva | <p>Avalíase a aprendizaxe asociada aos contidos iniciais desenvolvidos na materia: os fundamentos básicos de Química Cuántica e a súa aplicación a sistemas sinxelos.</p> <p>A proba poderá combinar preguntas de resposta múltiple ou de resposta breve.</p> <p>Competencias avaliadas: A1, A8, A14</p> | 10 |



| | | |
|--------------------------|---|----|
| Proba mixta | <p>Avalíase a aprendizaxe asociada a todos os contidos desenvolvidos na materia.</p> <p>Proba con dúas partes diferenciadas, unha que inclúe preguntas de resposta múltiple ou de resposta breve (50%) e outra de desenvolvemento e resolución de problemas (50%).</p> <p>Competencias avaliadas: A1, A8, A12, A14, A15, A21, B2, B3</p> | 70 |
| Prácticas de laboratorio | <p>Avalíase a capacidade para resolver unha serie de problemas prácticos propostos, relacionados cos contidos de Química Cuántica, empregando programas informáticos de uso habitual en cálculos científicos.</p> <p>Avalíase tamén a presentación final escrita dos resultados obtidos.</p> <p>Competencias avaliadas: A1, A8, A21, C1, C3</p> | 10 |
| Traballos tutelados | <p>Avalíase o traballo en grupo das actividades non presenciais propostas. Avalíase tanto a resolución da actividade, como a presentación escrita e oral.</p> <p>A cualificación é única para todos os membros dun mesmo grupo.</p> <p>Competencias avaliadas: A1, A8, A16, B2, B3, B5, C1, C3</p> | 10 |

Observacións avaliación



Requisitos para aprobar a materia:

- É requisito imprescindible realizar as prácticas e participar en todas as demais actividades avaliadas para poder aprobar a materia.

- Para poder realizar as prácticas da materia é necesario

a asistencia regular ás clases maxistras e aos seminarios en grupos pequenos, así como realizar a proba obxectiva de mediados do cuadrimestre.

- Para que se teñan en conta todas as actividades que contribúen

á avaliación será preciso obter unha cualificación mínima de 1.5 (sobre 5)

en cada unha das partes diferenciadas da proba mixta final e unha

cualificación mínima de 4.0 (sobre un máximo de 10).

- Considerarase aprobada a materia cando a cualificación final sexa

igual ou superior a 5 (sobre un máximo de 10) e se alcanzara a cualificación

mínima na proba mixta final.

- De non ter alcanzado a cualificación mínima na proba mixta

final a materia figurará como suspensa, aínda que a media das calificacións

obtidas nas distintas metodoloxías sexa superior a 5 (sobre un máximo de 10), en

cuxo caso a cualificación final outorgada será de 4.5.

Cualificación "non presentado":

- A cualificación de non presentado terana aqueles alumnos que

non realizasen a proba obxectiva de mediados do cuadrimestre, nin as prácticas

nin a proba mixta final.

Segunda oportunidade:

- A segunda oportunidade de xullo enténdese como unha

segunda oportunidade de realización da proba mixta final. Consecuentemente,

mantéñense as cualificacións das prácticas de laboratorio, da proba obxectiva e

dos traballos tutelados obtidas ao longo do curso, mentres que a cualificación

da proba mixta da segunda oportunidade substituirá a obtida na proba mixta

da primeira oportunidade.

- Os alumnos que sexan avaliados na chamada

"segunda oportunidade" só poderán optar a matrícula de honra se o

número máximo destas para o correspondente curso non se cubriu na súa totalidade

na "primeira oportunidade".

Sucesivos cursos académicos:

- O proceso de ensino-aprendizaxe, incluída a avaliación,

refírese a un curso académico e, polo tanto, volta a comezar cun novo curso,

incluídas todas as actividades e procedementos de avaliación que se programen

para o devandito curso.

Datas proba mixta final:

- As probas mixtas finais correspondentes ás

dúas oportunidades realizaranse nas datas oficiais aprobadas pola Xunta de

Facultade do Centro.

Fontes de información

Bibliografía básica

- LEVINE, I.N. (2004). FISCOQUÍMICA 5ª ed. McGraw-Hill
- ATKINS, P.W. (2010). PHYSICAL CHEMISTRY. Oxford
- ENGEL, T REID, P. (2010). PHYSICAL CHEMISTRY. Pearson Education
- McQUARRIE (1997). PHYSICAL CHEMISTRY. University Science Books
- ATKINS, P.W. (2008). QUÍMICA FÍSICA. Panamericana
- ENGEL, T; REID, P. (2006). QUÍMICA FÍSICA. Pearson Addison Wesley



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

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