



Guía Docente				
Datos Identificativos				2016/17
Asignatura (*)	Química Física 1		Código	610G01016
Titulación	Grao en Química			
Descriptores				
Ciclo	Período	Curso	Tipo	Créditos
Grao	1º cuatrimestre	Segundo	Obrigatoria	6
Idioma	CastelánInglés			
Modalidade docente	Presencial			
Prerrequisitos				
Departamento	Química Física e Enxeñaría Química 1			
Coordinación	Rodríguez Barro, Pilar	Correo electrónico	pilar.rbarro@udc.es	
Profesorado	Rodríguez Barro, Pilar Vilariño Barreiro, María Teresa	Correo electrónico	pilar.rbarro@udc.es teresa.vilarino@udc.es	
Web				
Descripción xeral	<p>A Química Física adícase ao estudo dos principios físicos fundamentais que gobernan as propiedades e o comportamento dos sistemas químicos. Un sistema químico pode ser estudiado dende un punto de vista microscópico ou macroscópico.</p> <p>Neste primeiro curso de Química Física introduzese 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 demáis ramas da Química que necesariamente aplican boa parte dos conceptos estudiados nesta materia ao desenvolvemento dos seus programas específicos.</p>			

Competencias do título	
Código	Competencias do título
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 solucionalos.
A16	Adquirir, avaliar e utilizar os datos e información bibliográfica e técnica relacionada coa Química.
A21	Comprender os aspectos cualitativos e cuantitativos dos problemas químicos.
B2	Resolver problemas de forma efectiva.
B3	Aplicar un pensamento crítico, lóxico e creativo.
B5	Traballar de forma colaborativa.
C1	Expresarse correctamente, tanto de forma oral coma escrita, nas linguas oficiais da comunidade autónoma.
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.

Resultados da aprendizaxe			
Resultados de aprendizaxe			Competencias do título
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.	- 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. - Comutabilidade.
2. Movimento traslacional: a partícula nunha caixa.	- 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. Movimento vibracional: o oscilador armónico.	- Funcións de onda: polinomios de Hermite. - Enerxía de vibración: niveis de enerxía. - O oscilador harmónico como un modelo de vibración de moléculas. - Anarmonicidade.
4. Movimento de rotación: o rotor ríxido.	- Movimento dunha partícula nun anel. - Funcións de onda: polinomios de Legendre. Harmónicos esféricos. - Enerxía de rotación: niveis enerxéticos. - Quantización do momento angular.
5. Átomos hidroxenoides.	- 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.	- Método de perturbacións. - Método de variacións: teorema variacional. - Funcións variacionais lineais: ecuacións seculares.



7- Átomos polielectrónicos.	- Átomo de helio. - O momento angular de spin. - O principio de exclusión de Pauli. - Táboa Periódica.
8. Espectroscopía atómica.	- 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.	- 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.	- Consideracións xerais sobre a formación do enlace. - Moléculas diatómicas homonucleares. - Moléculas diatómicas heteronucleares. - Enlace polar: eletronegatividade.
11. Moléculas conxugadas e aromáticas.	- 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. Introdución a termodinámica estadística.	- Fundamentos do método mecánico-estatístico. - Bases da Termodinámica Estatística. - Estudo termodinámico estatístico de gases ideais. - Interpretación estatística das propiedades termodinámicas dos sólidos.

## Planificación

Metodoloxías / probas	Competencias	Horas presenciais	Horas non presenciais / traballo autónomo	Horas totais
Sesión maxistral	A1 A8 A12 A21	28	56	84
Seminario	A14 A15 B2 B3	10	25	35
Prácticas de laboratorio	A1 A8 A21 C1 C3	10	5	15
Traballos tutelados	A1 A8 A16 B2 B3 B5 C1 C3	0	10	10
Proba obxectiva	A1 A8 A14	1	0	1
Proba obxectiva	A1 A8 A14	1	0	1
Proba mixta	A1 A8 A12 A14 A15 A21 B2 B3	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	Descripción
Sesión maxistral	Explicacións orais complementadas co uso de medios audiovisuais e a introdución de algunas preguntas dirixidas aos estudiantes, coa finalidade de desenvolver os contidos básicos da materia e facilitar a súa aprendizaxe.



Seminario	Actividade a desenvolver en grupos reducidos. Estudo intensivo dos contidos desenvolvidos nas sesións maxistrais. Discútense e resolvense cuestiós e problemas relacionados cos contidos das materia, con apoio e supervisión directa do profesor. Previamente á sesión presencial, a través da plataforma virtual, indícanse as actividades a realizar antes e durante cada sesión.
Prácticas de laboratorio	Actividade práctica a desenvolver en grupos reducidos nos laboratorios de informática. Propóñense e resolvense cuantitativa ou cualitativamente problemas relacionados cos contidos da Química Cuántica. Empréganse programas informáticos de uso habitual en cálculos científicos. O alumno deberá resolver e entregar un cuestionario referido ás prácticas desenvolvidas.
Traballos tutelados	Actividade no presencial a realizar en grupo. A actividade serán proposta polos profesores a través da plataforma virtual; os alumnos deben realizala en grupo dentro do prazo establecido previamente; o resultado final debe entregarse por escrito e, posteriormente, debe presentarse oralmente ao profesor nunha titoría presencial. Esta actividade pretende promover a aprendizaxe autónoma dos estudiantes, baixo a tutela do profesor.
Proba obxectiva	Proba escrita curta realizada no horario de clase a mediados do cuatrimestre. A proba poderá combinar preguntas de resposta múltiple ou de respuesta breve. Avalíase a aprendizaxe asociada aos contidos iniciais desenvolvidos na materia: os fundamentos básicos de Química Cuántica e a súa aplicación a sistemas sinxelos. Nunha sesión presencial posterior, resólvense e discuten as solucións correctas da proba, de modo que o alumno recibe retroalimentación de como está a ser o seu aproveitamento do curso.
Proba obxectiva	Proba escrita curta realizada no horario de clase a finais do cuatrimestre. A proba poderá combinar preguntas de respuesta múltiple ou de respuesta breve. Avalíase a aprendizaxe asociada aos contidos referidos á aplicación da Química Cuántica a átomos e moléculas. Nunha sesión presencial posterior, resólvense e discuten as solucións correctas da proba, de modo que o alumno recibe retroalimentación de como está a ser o seu aproveitamento do curso.
Proba mixta	Proba escrita final que combina preguntas de respuesta múltiple ou de respuesta breve con preguntas de resolución de problemas. Avalíase a aprendizaxe asociada a todos os contidos desenvolvidos na materia. Realízase nas datas aprobadas pola Xunta de Facultade do Centro.

## Atención personalizada

Metodoloxías	Descripción
Sesión maxistral	No caso dos traballos tutelados, cada grupo de estudiantes deberá concertar unha titoría presencial co profesor correspondente para discutir a actividade non presencial proposta.
Seminario	
Traballos tutelados	Ademais, recoméndase aos alumnos o uso de titorías individualizadas para resolver todas as dúbidas, cuestiós e conceptos que non quedasen claros referentes tanto ás sesións maxistrais coma aos seminarios e traballos tutelados.  Os estudiantes acollidos ao réxime de " recoñecemento de dedicación a tempo parcial ou dispensa académica de exención de asistencia", de acordo coas normas da UDC, terán atención específica titorizada cuando o alumno así o solicite. A demanda do estudiante, proporcionarase axuda titorizada en todo o referido aos contidos e desenvolvemento da materia, e proporánse traballo específico en forma de boletíns de problemas representativos da materia. que o alumno deberá resolver de maneira individual e, posteriormente, acudir a titorías para correxilos e solventar as dúbidas.

## Avaluación

Metodoloxías	Competencias	Descripción	Cualificación
--------------	--------------	-------------	---------------



Proba obxectiva	A1 A8 A14	Avalíase a aprendizaxe asociada aos contidos iniciais desenvolvidos na materia: os fundamentos básicos de Química Cuántica e a súa aplicación a sistemas sinxelos. A proba poderá combinar preguntas de resposta múltiple ou de resposta breve.	7.5
Proba mixta	A1 A8 A12 A14 A15 A21 B2 B3	Avalíase a aprendizaxe asociada a todos os contidos desenvolvidos na materia. 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%).	70
Prácticas de laboratorio	A1 A8 A21 C1 C3	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. Avalíase tamén a presentación final escrita dos resultados obtidos.	10
Traballos tutelados	A1 A8 A16 B2 B3 B5 C1 C3	Avalíase o traballo en grupo das actividades non presenciais propostas. Avalíase tanto a resolución da actividade, como a presentación escrita e oral. A cualificación é única para todos os membros dun mesmo grupo.	5
Proba obxectiva	A1 A8 A14	Avalíase a aprendizaxe asociada aos contidos relacionados coa aplicación da Química Cuántica a átomos e moléculas. A proba poderá combinar preguntas de resposta múltiple ou de resposta breve.	7.5

## Observacións avaliación



## Requisitos para aprobar a materia:

- É requisito imprescindible realizar as prácticas para poder aprobar a materia.
- Para poder realizar as prácticas da materia é necesario a asistencia regular ás clases maxistrais.
- 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 terá aqueles alumnos que non realizaren 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, das probas obxectivas 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 de estas para o correspondente curso non se cubriu na súa totalidade na "primeira oportunidade".

Estudantes con recoñecemento de dedicación a tempo parcial e dispensa académica de exención de asistencia (de acordo coa normativa da UDC): Apílanse os mesmos criterios de avaliación indicados anteriormente, mais están exentos da asistencia regular ás clases maxistrais en aula e da realización dos traballos tutelados e as probas obxectivas.

A asistencia ás prácticas é obligatoria para poder superar a materia. Facilitarase, na medida do posible, a elección do grupo de prácticas co gallo de adaptar as datas á disponibilidade do estudiante.

A cualificación final será a suma do 10% da cualificación obtida nas prácticas e o 90% da calificación obtida na proba mixta. Estas porcentaxes de cualificación aplicaranse ás dúas oportunidades.

A cualificación de "non presentado" terá aqueles alumnos que non realizaren a proba mixta final.

## 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	
	<ul style="list-style-type: none"><li>- ENGEL, T; REID, P. (2006). QUÍMICA FÍSICA. Pearson Addison Wesley</li><li>- ENGEL,T REID,P. (2013). PHYSICAL CHEMISTRY. Pearson Education</li><li>- ATKINS, P.W. (2008). QUÍMICA FÍSICA. Panamericana</li><li>- ATKINS, P.W. (2014). PHYSICAL CHEMISTRY. Oxford University Press</li><li>- McQUARRE (1997). PHYSICAL CHEMISTRY. University Science Books</li></ul>

**Bibliografía complementaria**

- Science Direct (). <http://www.sciencedirect.com>.
  - Publicaciones de la American Chemical Society (). <http://pubs.acs.org/about.html>.
  - <http://www.m-w.com> (). DICCCIONARIO DE INGLÉS ONLINE (Merriam Webster).
  - 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-2013/lecture-notes/>.
  - Página Web de ISI Web of Knowledge (). <http://isi02.isiknowledge.com/>.
  - LOWE (2006). QUANTUM CHEMISTRY 3<sup>a</sup> Ed.. Elsevier
  - RAFF, L.M. (2001). PRINCIPLES OF PHYSICAL CHEMISTRY. Prentice Hall
  - HERNANDO, J. M. (1974). PROBLEMAS DE QUÍMICA FÍSICA. Gráficas Andrés Martín
  - McQUARRE (2008). QUANTUM CHEMISTRY. University Science Books
  - LEVINE, I.N. (2001). QUÍMICA CUÁNTICA 5<sup>a</sup> ed. Prentice Hall
  - DÍAZ PEÑA,M. ROIG MUNTANER, A. (1988). QUÍMICA FÍSICA. Alhambra
  - LEVINE, I.N. (2004). FISICOQUÍMICA 5<sup>a</sup> edición. McGraw-Hill
- <br />

**Recomendacións****Materias que se recomenda ter cursado previamente**

Matemáticas 1/610G01001

Matemáticas 2/610G01002

Física 1/610G01003

Física 2/610G01004

Química 1/610G01007

Química 2/610G01008

**Materias que se recomenda cursar simultaneamente****Materias que continúan o temario**

Química Física 2/610G01017

**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