



| Guía Docente | | | | |
|-----------------------|---|--------------------|---|----------|
| Datos Identificativos | | | 2017/18 | |
| Asignatura (*) | Química Física 1 | Código | 610G01016 | |
| Titulación | | | | |
| Descritores | | | | |
| Ciclo | Período | Curso | Tipo | Créditos |
| Grao | 1º cuatrimestre | Segundo | Obrigatoria | 6 |
| Idioma | CastelánInglés | | | |
| Modalidade docente | Presencial | | | |
| Prerrequisitos | | | | |
| Departamento | Química | | | |
| 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 | | | | |
| Descrición 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 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 partir de propiedades moleculares (Termodinámica Estadística).</p> <p>Os contidos que se imparten nesta materia constitúen 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> | | | |

| Competencias do título | |
|------------------------|------------------------|
| Código | Competencias do título |

| Resultados da aprendizaxe | | | |
|---|---|-------------------------------|----------|
| Resultados de aprendizaxe | Competencias do título | | |
| | Coñecer os principios da Química Cuántica | A1 A8 A14 A15 A16 | B2 B5 |
| 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 ríxido. | <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 polieletrónicos. | <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 estadística. | <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 | 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 | 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>Discútense e resolvense cuestións e problemas relacionados cos contidos da 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>O alumno deberá resolver e entregar un cuestionario referido ás prácticas desenvolvidas.</p> |
| Traballos tutelados | <p>Actividades en grupo que pretenden promover a aprendizaxe autónoma dos estudantes, baixo a tutela do profesor.</p> <p>Propóñense actividades relacionadas cos seminarios da materia, que deben resolverse en grupo e explicarse posteriormente ao profesor nunha titoría presencial.</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 discuten as solucións correctas da proba, de modo que o alumno recibe retroalimentación de como está a ser o seu aproveitamento do curso.</p> |
| Proba obxectiva | <p>Proba escrita curta realizada no horario de clase a finais do cuadrimestre.</p> <p>A proba poderá combinar preguntas de resposta múltiple ou de resposta breve.</p> <p>Avalíase a aprendizaxe asociada aos contidos referidos á aplicación da Química Cuántica a átomos e moléculas.</p> <p>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.</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 |
|--|---|
| Sesión maxistral Seminario Traballos tutelados | <p>No caso dos traballos tutelados, cada grupo de estudantes deberá concertar unha titoría presencial co profesor correspondente para discutir a actividade non presencial proposta.</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>Os estudantes 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 estudante, proporcionarase axuda titorizada en todo o referido aos contidos e desenvolvemento da materia, e proporánselle 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.</p> |

Avaliación

| Metodoloxías | Competencias | Descrición | Cualificación |
|--------------------------|--------------------------------|--|---------------|
| Proba obxectiva | A1 A8 A14 | <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> | 7.5 |
| Proba mixta | A1 A8 A12 A14 A15 A21 B2 B3 | <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> | 70 |
| Prácticas de laboratorio | A1 A8 A21 C1 C3 | <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> | 10 |
| Traballos tutelados | A1 A8 A16 B2 B3 B5 C1 C3 | <p>Avalíase a resolución das actividades non presenciais propostas e a participación activa na tutoría presencial.</p> | 5 |



| | | | |
|-----------------|-----------|--|-----|
| Proba obxectiva | A1 A8 A14 | Avaliase 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 maxistras.
- Para que se teñan en conta todas as actividades que contribúen á avaliación será preciso obter unha cualificación mínima de 2.0 (sobre 5) en cada unha das partes diferenciadas da proba mixta final e unha cualificación mínima de 4.5 (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 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):

Aplicanse os mesmos criterios de avaliación indicados anteriormente, mais están exentos da asistencia regular as clases maxistras en aula e da realización dos traballos tutelados e as probas obxectivas.

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

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" terana 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 Facultades do Centro.

Fontes de información

Bibliografía básica

- ENGEL, T; REID, P. (2006). QUÍMICA FÍSICA. Pearson Addison Wesley
- ENGEL, T REID, P. (2013). PHYSICAL CHEMISTRY. Pearson Education
- ATKINS, P.W. (2008). QUÍMICA FÍSICA. Panamericana
- ATKINS, P.W. (2014). PHYSICAL CHEMISTRY. Oxford University Press
- McQUARRIE (1997). PHYSICAL CHEMISTRY. University Science Books



| | |
|------------------------------------|--|
| Bibliografía complementaria | <ul style="list-style-type: none">- Science Direct (). http://www.sciencedirect.com.- Publicaciones de la American Chemical Society (). http://pubs.acs.org/about.html.- http://www.m-w.com (). DICCIONARIO 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 3ª Ed.. Elsevier- 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- LEVINE, I.N. (2001). QUÍMICA CUÁNTICA 5ª ed. Prentice Hall- DÍAZ PEÑA, M. ROIG MUNTANER, A. (1988). QUÍMICA FÍSICA. Alhambra- LEVINE, I.N. (2004). FISCOQUÍMICA 5ª edición. McGraw-Hill <p> </p> |
|------------------------------------|--|

Recomendacións

Materias que se recomenda ter cursado previamente

Matemáticas 1/610G01001

Matemáticas 2/610G01002

Física 1/610G01003

Física 2/610G01004

Química Xeral 1/610G01007

Química Xeral 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