



Guía Docente				
Datos Identificativos			2023/24	
Asignatura (*)	Química Física 1		Código	610G01016
Titulación				
Descriptorios				
Ciclo	Período	Curso	Tipo	Créditos
Grao	1º cuadrimestre	Segundo	Obrigatoria	6
Idioma	CastelánInglés			
Modalidade docente	Presencial			
Prerrequisitos				
Departamento	Química			
Coordinación	Vilariño Barreiro, Maria Teresa		Correo electrónico	teresa.vilarino@udc.es
Profesorado	Barriada Pereira, José Luis		Correo electrónico	jose.barriada@udc.es
	Herrero Rodriguez, Roberto			r.herrero@udc.es
	Vilariño Barreiro, Maria Teresa			teresa.vilarino@udc.es
Web				
Descrición xeral	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 partires de propiedades moleculares (Termodinámica Estadística). 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.			

Competencias do título	
Código	Competencias do título

Resultados da aprendizaxe				
Resultados de aprendizaxe			Competencias do título	
Coñecer os principios da Química Cuántica	A1	B2	C3	
	A8	B5		
	A14			
	A15			
	A16			
Coñecer os principios da Termodinámica Estadística	A1	B2	C3	
	A12	B5		
	A14			
	A16			
Resolver novos problemas relacionados cos contidos desenvolvidos.	A1	B2	C1	
	A14	B5		
	A15			
	A16			
	A21			
Habilidade no manexo e a busca de bibliografía relacionada cos contidos da materia.	A14	B3	C1	
	A15			
	A16			
	A21			



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. - Conmutabilidade.
2. Movemento 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. Movemento 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. Movemento de rotación: o rotor ríxido.	- 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.	- 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 polieletrónicos.	- 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: electronegatividade.



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 ESTATÍSTICA	
12. Introducción a termodinámica estadística.	- 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	2	0	2
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	Actividade a desenvolver en grupos intermedios. Estudo intensivo dos contidos desenvolvidos nas sesións maxistrais. Discútense e resolvense cuestións e problemas relacionados cos contidos da 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	Actividades en grupo que pretenden promover a aprendizaxe autónoma dos estudantes, baixo a tutela do profesor. Propóñense actividades relacionadas cos seminarios da materia, que deben resolverse en grupo e explicarse posteriormente ao profesor nunha titoría presencial. Só poderán participar os estudantes que asistan de modo regular aos seminarios da materia (80%).



Proba obxectiva	Dúas probas curtas ao longo do cuadrimestre: - Primeira proba a mediados do cuadrimestre: avalíase a aprendizaxe asociada aos fundamentos básicos da Química Cuántica e a súa aplicación a sistemas sinxelos. - Segunda proba a finais do cuadrimestre: avalíase a aprendizaxe asociada á aplicación da Química Cuántica a átomos e moléculas. As probas poderán combinar preguntas de resposta múltiple e/ou de resposta breve. Nunha sesión presencial posterior, resólvense e discuten as solucións correctas de cada proba, de tal 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 resposta múltiple ou de resposta 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	Descrición
Seminario Traballos tutelados	No caso dos traballos tutelados, cada grupo de estudantes deberá concertar unha tutoría presencial co profesor correspondente para discutir a actividade non presencial proposta. Ademais, recoméndase aos alumnos o uso de tutorías individualizadas para resolver todas as dúbidas, cuestións e conceptos que non quedasen claros referentes tanto ás sesións maxistras coma aos seminarios e traballos tutelados. 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 tutorizada cuando o alumno así o solicite. A demanda do estudante, proporcionarase axuda tutorizada 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 tutorías para correxilos e solventar as dúbidas.

Avaliación

Metodoloxías	Competencias	Descrición	Cualificación
Proba obxectiva	A1 A8 A14	Realízanse dúas probas curtas ao longo do cuadrimestre que poderán combinar preguntas de resposta múltiple ou de resposta breve. - Primeira proba a mediados do cuadrimestre: avalíase a aprendizaxe asociada aos contidos iniciais desenvolvidos na materia, os fundamentos básicos de Química Cuántica e a súa aplicación a sistemas sinxelos. Terá un peso de un 10% na cualificación final. - Segunda proba a finais do cuadrimestre: avalíase a aprendizaxe asociada á aplicación da Química Cuántica a átomos e moléculas. Terá un peso de un 10% na cualificación final.	20
Proba mixta	A1 A8 A12 A14 A15 A21 B2 B3	Avalíase a aprendizaxe asociada a todos os contidos desenvolvidos na materia nas data oficial aprobada en Xunta de Facultade. 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%).	60
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 a resolución das actividades non presenciais propostas e a participación activa na tutoría presencial. Só os estudantes que asistan de xeito regular aos seminarios (80%) poderán participar e ser avaliados nesta actividade.	10
---------------------	-----------------------------	--	----

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 superar a materia é necesario acadar unha cualificación mínima de 4.0 (sobre un máximo de 10) na proba mixta final e a cualificación final, considerando tódalas metodoloxías de avaliación, ser igual ou superior a 5 (sobre un máximo de 10).
- De non ter acadado 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 a proba mixta.

Segunda oportunidade:

- Na segunda oportunidade, realizarase unha proba mixta final, cuxa cualificación substituirá á obtida na proba mixta da primeira oportunidade, mantendo as cualificacións do resto de actividades realizadas na avaliación continua cando a súa cualificación fose igual ou superior a 5.0 sobre 10. Os traballos tutelados e as probas obxectivas con cualificación inferior a 5.0 (sobre 10) poderán recuperarse na proba mixta final (sumando a porcentaxe correspondente ao peso da cualificación da proba mixta final). A cualificación das prácticas de laboratorio non poderá recuperarse.
- 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".

Convocatoria adiantada de decembro:

- É requisito imprescindible ter realizadas as prácticas para poder aprobar a materia.
- A avaliación consistirá nunha proba mixta que representará o 100% da cualificación final. Para superar a materia é necesario acadar unha cualificación mínima de 5.0 (sobre un máximo de 10) na proba mixta.
- De acadar a cualificación mínima de 5.0 na proba mixta e non ter as prácticas feitas, a materia figurará como suspensa cunha cualificación final de 4.5.

Estudantes con recoñecemento de dedicación a tempo parcial:

Aplicanse os mesmos criterios de avaliación indicados anteriormente.

Estudantes con dispensa académica de exención de asistencia (de acordo coa normativa da UDC):

Están exentos da asistencia regular as clases maxistrais 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.

Realización fraudulenta de probas ou actividades de avaliación

De acordo con artigo 11, apartado 4 b), do Regulamento disciplinar do estudantado da UDC, a realización fraudulenta das probas ou actividades de avaliación, implicará a cualificación de suspenso na convocatoria en que se comenta a falta e respecto da materia en que se cometese: o/a estudante será cualificado con "suspenso" (nota numérica 0) na convocatoria correspondente do curso académico, tanto se a comisión da falta se produce na primeira oportunidade como na segunda. Para isto, procederase a modificar a súa cualificación na acta de primeira oportunidade, se fose necesario.

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 - ENGEL, T REID, P. (2013). PHYSICAL CHEMISTRY. https://eur02.safelinks.protection.outlook.com/?url=https%3A%2F%2Fresolver.vitalsource.com%2F9781292 - ENGEL, T REID, P. (2006). QUÍMICA FÍSICA. https://bookshelf.vitalsource.com/#/search?q=9788483226995&request_token=eyJhbGciOiJkaXIiLCJlbmM - ATKINS, P.W. (2008). QUÍMICA FÍSICA. https://sfx.bugalia.org/aco?url_ver=Z39.88-2004&url_ctx_fmt=info:ofi/fmt:kev:mtx:ctx&ctx_e
Bibliografía complementaria	- Science Direct (). http://www.sciencedirect.com. - Publicaciones de la American Chemical Society (). http://pubs.acs.org/about.html. - 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-2013/lecture-notes/. - http://www.m-w.com (). DICCIONARIO DE INGLÉS ONLINE (Merriam Webster). - 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). QUIMICA CUÁNTICA 5ª ed. Prentice Hall - DÍAZ PEÑA, M. ROIG MUNTANER, A. (1988). QUÍMICA FÍSICA. Alhambra - LEVINE, I.N. (2004). FISICOQUÍMICA 5ª edición. McGraw-Hill

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

- Programa Green Campus Facultade de Ciencias Para axudar a conseguir unha contorna inmediata sustentable e cumprir co punto 6 da "Declaración Ambiental da Facultade de Ciencias (2020)", os traballos documentais que se realicen nesta materia: a. Solicitaranse maioritariamente en formato virtual e soporte informático. b. De realizarse en papel: Non se empregarán plásticos. Realizaranse impresións a dobre cara. Empregarase papel reciclado. Evitarase a realización de borradores. - Igualdade de Xénero Segundo se recolle nas distintas normativas de aplicación para a docencia universitaria deberase incorporar a perspectiva de xénero nesta materia (usarase linguaxe non sexista, utilizarase bibliografía de autores/as de ambos sexos, propiciarse a intervención en clase de alumnos e alumnas) asimesmo, traballarase para identificar e modificar prexuízos e actitudes sexistas e influirase na contorna para modificalos e fomentar valores de respecto e igualdade. No caso de detectar situacións de discriminación por razón de xénero, proporanse accións e medidas para corrixilas.



(*)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