



| Guía Docente          |   |                    |   |          |
|-----------------------|---|--------------------|---|----------|
| Datos Identificativos |   |                    |   | 2024/25  |
| 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          | Vilariño Barreiro, María Teresa   | Correo electrónico | teresa.vilarino@udc.es  |          |
| Profesorado           | Barriada Pereira, José Luis<br>Herrero Rodriguez, Roberto<br>Martínez Cabanas, María<br>Vilariño Barreiro, María Teresa   | Correo electrónico | jose.barriada@udc.es<br>r.herrero@udc.es<br>maria.martinez.cabanas@udc.es<br>teresa.vilarino@udc.es |          |
| Web                   |   |                    |   |          |
| Descrición xeral      | 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). 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 / Resultados do título |                                     |
|-------------------------------------|-------------------------------------|
| Código                              | Competencias / Resultados do título |

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



|   |           |          |    |
|---|-----------|----------|----|
| Habilidade no emprego de ferramentas informáticas para a resolución de problemas. | A8<br>A15 | B2<br>B3 | C3 |
|---|-----------|----------|----|

| Contidos  |   |
|---|---|
| Temas   | Subtemas  |
| QUÍMICA CUÁNTICA                                    |   |
| 1. Postulados da Mecánica Cuántica.                 | <ul style="list-style-type: none"><li>- Primeiro postulado: o estado dun sistema cuántico.</li><li>- Segundo postulado: operador asociado a calquera variable observable.</li><li>- Terceiro postulado: ecuación de autovalores.</li><li>- Cuarto postulado: o valor medio dunha propiedade.</li><li>- Quinto postulado: evolución temporal do estado dun sistema cuántico. Ecuación de Schrödinger dependente do tempo.</li><li>- Conmutabilidade.</li></ul> |
| 2. Movemento traslacional: a partícula nunha caixa. | <ul style="list-style-type: none"><li>- A partícula nunha caixa unidimensional: funcións de onda e niveis de enerxía.</li><li>- A partícula nunha caixa bidimensional: separación de variables e dexeneración.</li><li>- A partícula nunha caixa tridimensional.</li></ul>  |
| 3. Movemento vibracional: o oscilador armónico.     | <ul style="list-style-type: none"><li>- Funcións de onda: polinomios de Hermite.</li><li>- Enerxía de vibración: niveis de enerxía.</li><li>- O oscilador harmónico como un modelo de vibración de moléculas.</li><li>- Anarmonicidade.</li></ul>   |
| 4. Movemento de rotación: o rotor ríxido.           | <ul style="list-style-type: none"><li>- Movemento dunha partícula nun anel.</li><li>- Funcións de onda: polinomios de Legendre. Harmónicos esféricos.</li><li>- Enerxía de rotación: niveis enerxéticos.</li><li>- Cuantización do momento angular.</li></ul>   |
| 5. Átomos hidroxenoides.                            | <ul style="list-style-type: none"><li>- Formulación e resolución da ecuación de Schrödinger.</li><li>- Funcións de onda radial e angular.</li><li>- Niveis de enerxía.</li><li>- Orbital atómico.</li><li>- Función de distribución radial.</li><li>- Funcións de onda real: representación radial e angular.</li><li>- Efecto Zeeman</li></ul>   |
| 6. Métodos aproximados.                             | <ul style="list-style-type: none"><li>- Método de perturbacións.</li><li>- Método de variacións: teorema variacional.</li><li>- Funcións variacionais lineais: ecuacións seculares.</li></ul>   |
| 7- Átomos polieletrónicos.                          | <ul style="list-style-type: none"><li>- Átomo de helio.</li><li>- O momento angular de spin.</li><li>- O principio de exclusión de Pauli.</li><li>- Táboa Periódica.</li></ul>  |
| 8. Espectroscopía atómica.                          | <ul style="list-style-type: none"><li>- Configuración electrónica: os niveis de enerxía.</li><li>- Momento angular orbital total: acoplamento spin-órbita e acoplamento j-j.</li><li>- Termos atómicos. Regras de Hund. Regras de selección.</li></ul>  |
| 9. O enlace químico. O ión-molécula de hidróxeno.   | <ul style="list-style-type: none"><li>- Aproximación de Born-Oppenheimer.</li><li>- Teoría de orbitais moleculares e teoría do enlace de valencia.</li><li>- Aplicación do método de orbitais moleculares para o ión-molécula de hidróxeno.</li><li>- Orbitais moleculares: enlazantes y antienlazantes.</li></ul>  |
| 10. Moléculas diatómicas.                           | <ul style="list-style-type: none"><li>- Consideracións xerais sobre a formación do enlace.</li><li>- Moléculas diatómicas homonucleares.</li><li>- Moléculas diatómicas heteronucleares.</li><li>- Enlace polar: electronegatividade.</li></ul>   |



|   |   |
|---|---|
| 11. Moléculas conxugadas e aromáticas.        | <ul style="list-style-type: none"> <li>- Os métodos semiempíricos.</li> <li>- Aproximación pi-electrón.</li> <li>- Método do electrón libre (FEMO).</li> <li>- Teoría de orbitais moleculares aplicada as moléculas conxugadas e aromáticas: aproximación Hückel.</li> </ul>                  |
| <b>TERMODINÁMICA ESTATÍSTICA</b>              |   |
| 12. Introducción a termodinámica estadística. | <ul style="list-style-type: none"> <li>- Fundamentos do método mecánico-estadístico.</li> <li>- Bases da Termodinámica Estatística.</li> <li>- Estudo termodinámico estatístico de gases ideais.</li> <li>- Interpretación estatística das propiedades termodinámicas dos sólidos.</li> </ul> |

| Planificación  |                                |   |                         |              |
|--|--------------------------------|---|-------------------------|--------------|
| Metodoloxías / probas  | Competencias / Resultados      | Horas lectivas (presenciais e virtuais) | Horas 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<br>C1 C3    | 0                                       | 10                      | 10           |
| Proba obxectiva  | A1 A8 A14                      | 2                                       | 0                       | 2            |
| Proba mixta  | A1 A8 A12 A14 A15<br>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 intermedios.</p> <p>Estudo intensivo dos contidos desenvolvidos nas sesións maxistras.</p> <p>Discútese 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> <p>Só poderán participar os estudantes que asistan de modo regular aos seminarios da materia (80%).</p>              |



|                 |  |
|-----------------|--|
| Proba obxectiva | <p>Dúas probas curtas ao longo do cuadrimestre:</p> <ul style="list-style-type: none"><li>- Primeira proba a mediados do cuadrimestre: avalíase a aprendizaxe asociada aos fundamentos básicos da Química Cuántica e a súa aplicación a sistemas sinxelos.</li><li>- Segunda proba a finais do cuadrimestre: avalíase a aprendizaxe asociada á aplicación da Química Cuántica a átomos e moléculas.</li></ul> <p>As probas poderán combinar preguntas de resposta múltiple e/ou de resposta breve.</p> <p>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.</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   |
|----------------------------------|--|
| Seminario<br>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 / Resultados      | Descrición   | Cualificación |
|-----------------|--------------------------------|--|---------------|
| Proba obxectiva | A1 A8 A14                      | <p>Realízanse dúas probas curtas ao longo do cuadrimestre que poderán combinar preguntas de resposta múltiple ou de resposta breve.</p> <ul style="list-style-type: none"><li>- 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.</li><li>- 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.</li></ul> | 20            |
| Proba mixta     | A1 A8 A12 A14 A15<br>A21 B2 B3 | <p>Avalíase a aprendizaxe asociada a todos os contidos desenvolvidos na materia nas data oficial aprobada en Xunta de Facultade.</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>   | 60            |



|                          |                             |   |    |
|--------------------------|-----------------------------|---|----|
| Prácticas de laboratorio | A1 A8 A21 C1 C3             | Avaliase 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.<br>Avaliase tamén a presentación final escrita dos resultados obtidos. | 10 |
| Traballos tutelados      | A1 A8 A16 B2 B3 B5<br>C1 C3 | Avaliase a resolución das actividades non presenciais propostas e a participación activa na tutoría presencial.<br>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 maxistras.
- 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.

Todos os aspectos relacionados con "dispensa académica", "dedicación ao estudo", "permanencia" e "fraude académica" rexeranse de acordo coa normativa académica vixente da UDC (/gl/normativa/academica/)

### 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=eyJhbGciOiJIc2EiLCJlbmM](https://bookshelf.vitalsource.com/#/search?q=9788483226995&request_token=eyJhbGciOiJIc2EiLCJlbmM)
- ATKINS, P.W. (2008). QUÍMICA FÍSICA.  
[https://sfx.bugalicia.org/aco?url\\_ver=Z39.88-2004&url\\_ctx\\_fmt=info:ofi/fmt:kev:mtx:ctx&ctx\\_e](https://sfx.bugalicia.org/aco?url_ver=Z39.88-2004&url_ctx_fmt=info:ofi/fmt:kev:mtx:ctx&ctx_e)



|                                    |  |
|------------------------------------|--|
| <b>Bibliografía complementaria</b> | <ul style="list-style-type: none"><li>- Science Direct (). <a href="http://www.sciencedirect.com">http://www.sciencedirect.com</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>- 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-2013/lecture-notes/">http://ocw.mit.edu/courses/chemistry/5-61-physical-chemistry-fall-2013/lecture-notes/</a>.</li><li>- <a href="http://www.m-w.com">http://www.m-w.com</a> (). DICCIONARIO DE INGLÉS ONLINE (Merriam Webster).</li><li>- LOWE (2006). QUANTUM CHEMISTRY 3ª Ed.. Elsevier</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>- LEVINE, I.N. (2001). QUÍMICA CUÁNTICA 5ª ed. Prentice Hall</li><li>- DÍAZ PEÑA, M. ROIG MUNTANER, A. (1988). QUÍMICA FÍSICA. Alhambra</li><li>- LEVINE, I.N. (2004). FISCOQUÍMICA 5ª edición. McGraw-Hill</li></ul> <p>&lt;br /&gt;</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

- 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, propiciarase 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