



Guía Docente				
Datos Identificativos			2015/16	
Asignatura (*)	Química Física 1		Código	610G01016
Titulación	Grao en Química			
Descriptor				
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	Rodriguez Barro, Pilar	Correo electrónico	pilar.rbarro@udc.es	
Profesorado	Garcia Dopico, Maria Victoria	Correo electrónico	victoria.gdopico@udc.es	
	Rodriguez Barro, Pilar		pilar.rbarro@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
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 soluciónalos.
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	B2	C3
	A8	B5	
	A14		
	A15		
	A16		



Cofecer 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. - 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 ESTADÍSTICA	
12. Introducción a termodinámica estadística.	- Fundamentos do método mecánico-estadístico. - Bases da Termodinámica Estadística. - 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	29	58	87
Seminario	A14 A15 B2 B3	10	25	35
Prácticas de laboratorio	A1 A8 A21 C1 C3	10	3	13
Traballos tutelados	A1 A8 A16 B2 B3 B5 C1 C3	0	10	10
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	Actividade a desenvolver en grupos reducidos. Estudo intensivo dos contidos desenvolvidos nas sesións maxistrais. Discútese e resolvense cuestións e problemas relacionados cos contidos das materias, 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. A través da plataforma virtual da materia comunícanse datas, horarios e composición dos grupos prácticos.
Traballos tutelados	Actividades non presenciais a realizar en grupo (2-3 persoas). O alumnado deberá realizar dúas actividades relacionadas con algúns dos contidos do programa. 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 tutoría presencial. Estas actividades pretenden promover a aprendizaxe autónoma dos estudantes, baixo a tutela do profesor.
Proba obxectiva	Proba escrita curta realizada no horario de clase a mediados do cuadrimestre. A proba poderá combinar preguntas de resposta múltiple ou de resposta 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 discúten 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 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
Traballos tutelados	Cada grupo de estudantes deberá concertar unha tutoría presencial co profesor correspondente para discutir as actividades non presenciais propostas. 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 maxistrais coma aos seminarios e traballos tutelados. As sesións de tutorías concertaranse mediante correo electrónico.

Avaliación

Metodoloxías	Competencias	Descrición	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.	10



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.	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 e aos seminarios en grupos reducidos, 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 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, 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 de estas 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 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	- 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

------------------------------------	--

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