



Guía docente				
Datos Identificativos			2019/20	
Asignatura (*)	Química Física 1	Código	610G01016	
Titulación	Grao en Química			
Descriptorios				
Ciclo	Periodo	Curso	Tipo	Créditos
Grado	1º cuatrimestre	Segundo	Obligatoria	6
Idioma	CastellanoInglés			
Modalidad docente	Presencial			
Prerrequisitos				
Departamento	Química			
Coordinador/a	Rodriguez Barro, Pilar	Correo electrónico	pilar.rbarro@udc.es	
Profesorado	Rodriguez Barro, Pilar	Correo electrónico	pilar.rbarro@udc.es	
	Vilariño Barreiro, María Teresa		teresa.vilarino@udc.es	
Web				
Descripción general	La Química Física se dedica al estudio de los principios físicos fundamentales que gobiernan las propiedades y el comportamiento de los sistemas químicos. Un sistema químico puede estudiarse desde un punto de vista microscópico o macroscópico. En este primer curso de Química Física se introduce la metodología del estudio microscópico de los átomos y las moléculas (Química Cuántica) y la metodología que permite calcular propiedades macroscópicas de los sistemas en equilibrio a partir de propiedades moleculares (Termodinámica Estadística). Los contenidos que se imparten en esta asignatura constituyen los fundamentos teóricos imprescindibles para la asignatura de Química Física 2 y un marco de referencia para las demás ramas de la Química que, necesariamente, aplican buena parte de los conceptos estudiados en esta asignatura en el desarrollo de sus programas específicos.			

Competencias del título	
Código	Competencias del título
A1	Utilizar la terminología química, nomenclatura, convenios y unidades.
A8	Conocer los principios de la Mecánica Cuántica y su aplicación a la estructura de átomos y moléculas.
A12	Relacionar las propiedades macroscópicas con las de átomos y moléculas.
A14	Demostrar el conocimiento y comprensión de conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química.
A15	Reconocer y analizar nuevos problemas y planear estrategias para solucionarlos.
A16	Adquirir, evaluar y utilizar los datos e información bibliográfica y técnica relacionada con la Química.
A21	Comprender los aspectos cualitativos y cuantitativos de los problemas químicos.
B2	Resolver un problema de forma efectiva.
B3	Aplicar un pensamiento crítico, lógico y creativo.
B5	Trabajar de forma colaborativa.
C1	Expresarse correctamente, tanto de forma oral como escrita, en las lenguas oficiales de la comunidad autónoma.
C3	Utilizar las herramientas básicas de las tecnologías de la información y las comunicaciones (TIC) necesarias para el ejercicio de su profesión y para el aprendizaje a lo largo de su vida.

Resultados de aprendizaje			
Resultados de aprendizaje		Competencias del título	
Conocer los principios de la Química Cuántica	A1	B2	C3
	A8	B5	
	A14		
	A15		
	A16		



Conocer los principios de la Termodinámica Estadística	A1 A12 A14 A16	B2 B5	C3
Resolver nuevos problemas relacionados con los contenidos desarrollados.	A1 A14 A15 A16 A21	B2 B5	C1 C3
Destreza en el manejo y la búsqueda de bibliografía relacionada con los contenidos de la asignatura.	A14 A15 A16 A21	B3	C1 C3
Destreza en el empleo de herramientas informáticas para la resolución de problemas.	A8 A15	B2 B3	C3

Contenidos	
Tema	Subtema
QUÍMICA CUÁNTICA	
1. Postulados de la Mecánica Cuántica	- Primer postulado: estado de un sistema cuántico. - Segundo postulado: operador asociado a toda variable observable. - Tercer postulado: ecuación de valores propios. - Cuarto postulado: valor medio de una propiedad. - Quinto postulado: evolución temporal del estado de un sistema cuántico. Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo. - Conmutabilidad
2. Movimiento traslacional: la partícula en una caja	- La partícula en una caja monodimensional: Funciones de onda y niveles de energía. - La partícula en una caja bidimensional: Separación de variables y degeneración. - La partícula en una caja tridimensional.
3. Movimiento vibracional: el oscilador armónico	- Funciones de onda: Polinomios de Hermite. - Energía de vibración: niveles energéticos. - El oscilador armónico como modelo de vibración de moléculas. - Anarmonicidad.
4. Movimiento rotacional: el rotor rígido	- Movimiento de una partícula en una anillo. - Funciones de onda: Polinomios de Legendre. Armónicos esféricos. - Energía de rotación: niveles energéticos. - Cuantización del momento angular.
5. Átomos hidrogenoides	- Formulación y resolución de la ecuación de Schrodinger. - Funciones de onda radial y angular. - Niveles energéticos. - Orbital atómico. - Función de distribución radial. - Funciones de onda reales: representación radial y angular. - Efecto Zeeman.
6. Métodos aproximados	- Método de perturbaciones. - Método de variaciones: teorema variacional. - Funciones variacionales lineales: ecuaciones seculares.



7. Átomos polieletrónicos	- Átomo de helio. - Momento angular de spin. - Principio de exclusión de Pauli. - Tabla Periódica.
8. Espectroscopía atómica	- Configuración electrónica: niveles energéticos. - Momento angular orbital total: acoplamiento spin-orbita y acoplamiento j-j. - Términos atómicos. Reglas de Hund. Reglas de selección.
9. El enlace químico. El ión-molécula de hidrógeno	- Aproximación de Born-Oppenheimer. - Teoría de orbitales moleculares y teoría de enlace de valencia. - Aplicación del método de orbitales moleculares al ion-molécula de hidrógeno. - Orbitales moleculares: enlazante y antienlazante.
10. Moléculas diatómicas	- Consideraciones generales para la formación de enlace. - Moléculas diatómicas homonucleares. - Moléculas diatómicas heteronucleares. - Enlace polar: electronegatividad.
11. Moléculas conjugadas y aromáticas	- Métodos semiempíricos. - Aproximación pi-electrónica. - Método del electrón libre (FEMO). - Teoría de orbitales moleculares aplicada a moléculas conjugadas y aromáticas: aproximación Hückel.
TERMODINÁMICA ESTADÍSTICA	
12. Introducción a la Termodinámica Estadística	- Fundamentos del método mecano-estadístico. - Bases de la termodinámica estadística. - Estudio termodinámico estadístico de gases ideales. - Interpretación estadística de las propiedades termodinámicas de los sólidos.

Planificación				
Metodologías / pruebas	Competencias	Horas presenciales	Horas no presenciales / trabajo autónomo	Horas totales
Sesión magistral	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
Trabajos tutelados	A1 A8 A16 B2 B3 B5 C1 C3	0	10	10
Prueba objetiva	A1 A8 A14	2	0	2
Prueba mixta	A1 A8 A12 A14 A15 A21 B2 B3	3	0	3
Atención personalizada		1	0	1
(*) Los datos que aparecen en la tabla de planificación són de carácter orientativo, considerando la heterogeneidad de los alumnos				

Metodologías	
Metodologías	Descripción
Sesión magistral	Exposición oral complementada con el uso de medios audiovisuales y la introducción de algunas preguntas dirigidas a los estudiantes, con la finalidad de desarrollar los contenidos básicos de la asignatura y facilitar su aprendizaje.



Seminario	Actividad a desarrollar en grupos reducidos. Estudio intensivo de los contenidos desarrollados en las sesiones magistrales. Se discuten y resuelven cuestiones y problemas relacionados con los contenidos de la asignatura, con apoyo y supervisión directa del profesor. Previamente a la sesión presencial, a través de la plataforma virtual, se indican las actividades a realizar antes y durante cada sesión.
Prácticas de laboratorio	Actividad práctica a desarrollar en grupos reducidos en aulas de informática. Se proponen y resuelven cuantitativa o cualitativamente problemas relacionados con los contenidos de Química Cuántica. Se emplean programas informáticos de uso habitual en cálculos científicos. El alumno deberá resolver y entregar un cuestionario referido a las prácticas realizadas.
Trabajos tutelados	Actividad en grupo que pretende promover el aprendizaje autónomo de los estudiantes, bajo la tutela del profesor. Se proponen actividades relacionadas con los seminarios de la asignatura, que han de resolverse en grupo y, posteriormente, explicarlas al profesor en una tutoría presencial. Sólo podrán participar los estudiantes que asistan de modo regular a los seminarios de la materia (80%).
Prueba objetiva	Dos pruebas escritas cortas a lo largo del cuatrimestre, a realizar en el horario de las sesiones magistrales: - Primera prueba a mediados de cuatrimestre. Se evalúa el aprendizaje asociado a los contenidos iniciales desarrollados en la asignatura: los fundamentos básicos de Química Cuántica y su aplicación a sistemas sencillos. - Segunda prueba a finales del cuatrimestre. Se evalúa el aprendizaje asociado a la aplicación de la Química Cuántica a átomos y moléculas. Las pruebas podrán combinar preguntas de respuesta múltiple y/o de respuesta breve. En una sesión presencial posterior, se resuelven y discuten las soluciones correctas de cada prueba, de tal modo que el alumno recibe retroalimentación de cómo está siendo su aprovechamiento del curso.
Prueba mixta	Prueba escrita final que combina preguntas de respuesta múltiple o de respuesta breve con preguntas de resolución de problemas. Se evalúa el aprendizaje asociado a todos los contenidos desarrollados en la asignatura. Se realiza en las fechas aprobadas por la Junta de Facultad del Centro.

Atención personalizada

Metodologías	Descripción
Seminario Trabajos tutelados	En el caso de los trabajos tutelados, cada grupo de alumnos deberá concertar una tutoría presencial con el profesor correspondiente para discutir la actividad presencial propuesta. Además, se recomienda a los alumnos el uso de tutorías individualizadas para resolver todas las dudas, cuestiones y conceptos que no hayan quedado claros referentes tanto a las sesiones magistrales como a los seminarios y trabajos tutelados. Aquellos alumnos que se acojan al régimen de "reconocimiento de dedicación a tiempo parcial y dispensa académica de exención de asistencia" según la normativa de la UDC, dispondrán de atención específica tutorizada cuando así lo solicite. A petición del alumno, se proporcionará ayuda tutorial en todo lo concerniente a los contenidos y desarrollo de la asignatura y se propondrá trabajo específico en forma de boletines de problemas representativos de la asignatura, que el alumno resolverá individualmente y, posteriormente, acudirá a tutoría para corrección y resolución de dudas.

Evaluación

Metodologías	Competencias	Descripción	Calificación
--------------	--------------	-------------	--------------



Prueba objetiva	A1 A8 A14	Se realizan dos pruebas cortas que podrán combinar preguntas de respuesta múltiple y/o de respuesta breve. Cada una de las pruebas tendrá el mismo peso en la calificación final (7.5%) - Primera prueba a mediados del cuatrimestre: se evalúa el aprendizaje asociado a los contenidos iniciales desarrollados en la asignatura: los fundamentos básicos de Química Cuántica y su aplicación a sistemas sencillos. - Segunda prueba a finales del cuatrimestre: se evalúa el aprendizaje asociado a la aplicación de la Química Cuántica a átomos y moléculas.	15
Prueba mixta	A1 A8 A12 A14 A15 A21 B2 B3	Se evalúa el aprendizaje asociado a todos los contenidos desarrollados en la asignatura en la fecha oficial aprobada en Xunta de Facultade. Prueba con dos partes diferenciadas, una que incluye preguntas de respuesta múltiple o de respuesta breve (50%) y otra de desarrollo y resolución de problemas (50%).	70
Prácticas de laboratorio	A1 A8 A21 C1 C3	Se evalúa la capacidad para resolver una serie de problemas prácticos propuestos, relacionados con los contenidos de Química Cuántica, empleando programas informáticos de uso habitual en cálculos científicos. Se evalúa también la presentación final escrita de los resultados obtenidos.	10
Trabajos tutelados	A1 A8 A16 B2 B3 B5 C1 C3	Se evalúa la resolución de las actividades no presenciales propuestas y la participación activa en la tutoría presencial. Sólo los alumnos que asistan regularmente a los seminarios (80%) podrán participar y ser evaluados en esta actividad.	5

Observaciones evaluación



Requisitos para aprobar la asignatura:

- Es requisito imprescindible realizar las prácticas para poder aprobar la asignatura.
- Para poder realizar las prácticas de la asignatura es necesario la asistencia regular a las clases magistrales.
- Para aprobar la asignatura es necesario alcanzar una calificación mínima de 4.5 (sobre un máximo de 10) en la prueba mixta final y la calificación final, considerando todas las metodologías de evaluación, ser igual o superior a 5 (sobre un máximo de 10).
- De no haber alcanzado la calificación mínima de 4.5 en la prueba mixta final, la asignatura figurará como suspensa, aunque la media de las calificaciones obtenidas en las distintas metodologías sea superior a 5 (sobre un máximo de 10), en cuyo caso la calificación final otorgada será de 4.5.

Calificación "no presentado":

- La calificación de no presentado la tendrán aquellos alumnos que no hayan realizado ni las prácticas ni la prueba mixta final.

Segunda oportunidad:

- La segunda oportunidad de julio se entiende como una segunda oportunidad de realización de la prueba mixta final. Consecuentemente, se mantienen las calificaciones de las prácticas de laboratorio, de las pruebas objetivas y de los trabajos tutelados obtenidas a lo largo del curso, mientras que la calificación de la prueba mixta de la segunda oportunidad sustituirá a la obtenida en la prueba mixta de la primera oportunidad.
- Los alumnos que sean evaluados en la llamada "segunda oportunidad" sólo podrán optar a matrícula de honor si el número máximo de éstas para el correspondiente curso no se ha cubierto en su totalidad en la "primera oportunidad".

Alumnado con reconocimiento de dedicación a tiempo parcial:

Se aplican los mismos criterios de evaluación indicados anteriormente.

Alumnado con dispensa académica de exención de asistencia (de acuerdo con la normativa de la UDC):

Están exentos de la asistencia regular a las clases presenciales en aula y de la realización de los trabajos tutelados y las pruebas objetivas.

La asistencia a las prácticas es obligatoria para superar la asignatura. Se facilitará, en la medida de lo posible, la elección de grupo de prácticas para adaptar las fechas a la disponibilidad del alumno.

La calificación final será la suma del 10% de la calificación obtenida en las prácticas de laboratorio y el 90% de la calificación obtenida en la prueba mixta. Estos porcentajes de

calificación se aplicarán a las dos oportunidades.

La calificación de

"no presentado" se otorgará a aquellos alumnos acogidos al mencionado

régimen de exención, siempre y cuando no se presenten a la prueba

mixta.

Fuentes de información

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



Complementária	- 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
----------------	--

Recomendaciones

Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente

Matemáticas 1/610G01001

Matemáticas 2/610G01002

Física 1/610G01003

Física 2/610G01004

Química General 1/610G01007

Química General 2/610G01008

Asignaturas que se recomienda cursar simultáneamente

Asignaturas que continúan el temario

Química Física 2/610G01017

Otros comentarios

(*) La Guía Docente es el documento donde se visualiza la propuesta académica de la UDC. Este documento es público y no se puede modificar, salvo cosas excepcionales bajo la revisión del órgano competente de acuerdo a la normativa vigente que establece el proceso de elaboración de guías