



## 1. Identificación

### 1.1. De la Asignatura

Curso Académico	2023/2024
Titulación	GRADO EN QUÍMICA y PROGRAMA ACADÉMICO DE SIMULTANEIDAD DE DOBLE TITULACIÓN CON ITINERARIO ESPECÍFICO DE GRADO EN QUÍMICA Y GRADO EN INGENIERÍA QUÍMICA
Nombre de la Asignatura	QUÍMICA FÍSICA I
Código	1630
Curso	TERCERO y TERCERO(IC)
Carácter	OBLIGATORIA
N.º Grupos	2
Créditos ECTS	6
Estimación del volumen de trabajo del alumno	150
Organización Temporal/Temporalidad	1 Cuatrimestre y 1 Cuatrimestre(IC)
Idiomas en que se imparte	ESPAÑOL

### 1.2. Del profesorado: Equipo Docente

Coordinación de la asignatura ADOLFO BASTIDA PASCUAL	Área/Departamento	QUÍMICA FÍSICA/QUÍMICA FÍSICA
	Categoría	CATEDRATICOS DE UNIVERSIDAD
	Correo Electrónico /	bastida@um.es
	Página web / Tutoría electrónica	www.um.es/dp-quimica-fisica/ Tutoría Electrónica: SÍ



Grupo de	Teléfono, Horario y	Duración	Día	Horario	Lugar
Docencia: 1 y 9 Coordinación de los grupos:1 y 9(IC)	Lugar de atención al alumnado	Anual	Martes	08:00- 10:00	868887479, Facultad de Química B1.1A.043
		Anual	Jueves	08:00- 10:00	868887479, Facultad de Química B1.1A.043

## 2. Presentación

El objetivo de la asignatura Química Física I es que el alumno de Química adquiera las principales herramientas quimicofísicas necesarias para el estudio de problemas de interés químico relacionados con la estructura molecular. Concretamente, en la primera parte de la materia se estudian los principios fundamentales de la mecánica cuántica y su aplicación a la descripción de las propiedades de átomos y moléculas, con especial énfasis en el estudio del enlace químico para, posteriormente describir el origen de los fenómenos espectroscópicos y el fundamento cuántico de las diferentes técnicas aplicadas al estudio de estructuras moleculares y la determinación de parámetros estructurales.

## 3. Condiciones de acceso a la asignatura

### 3.1 Incompatibilidades

No consta



## 3.2 Recomendaciones

Para una adecuada comprensión de los aspectos tratados en esta asignatura es necesario que el alumno maneje con soltura las operaciones matemáticas básicas como son el cálculo logarítmico, el manejo de números complejos, las representaciones gráficas y la interpretación de las mismas. Asimismo, es importante tener conocimientos de ecuaciones diferenciales ordinarias y en derivadas parciales, y los procedimientos de integración de las mismas.

## 4. Competencias

### 4.1 Competencias Básicas

- CB1. Que los estudiantes hayan demostrado poseer y comprender conocimientos en un área de estudio que parte de la base de la educación secundaria general, y se suele encontrar a un nivel que, si bien se apoya en libros de texto avanzados, incluye también algunos aspectos que implican conocimientos procedentes de la vanguardia de su campo de estudio
- CB2. Que los estudiantes sepan aplicar sus conocimientos a su trabajo o vocación de una forma profesional y posean las competencias que suelen demostrarse por medio de la elaboración y defensa de argumentos y la resolución de problemas dentro de su área de estudio
- CB3. Que los estudiantes tengan la capacidad de reunir e interpretar datos relevantes (normalmente dentro de su área de estudio) para emitir juicios que incluyan una reflexión sobre temas relevantes de índole social, científica o ética
- CB4. Que los estudiantes puedan transmitir información, ideas, problemas y soluciones a un público tanto especializado como no especializado
- CB5. Que los estudiantes hayan desarrollado aquellas habilidades de aprendizaje necesarias para emprender estudios posteriores con un alto grado de autonomía

### 4.2 Competencias de la titulación

- CG1. Capacidad de análisis y síntesis en los diferentes temas químicos tratados.
- CG2. Capacidad de organización y planificación de los estudios y enseñanzas químicas recibidas.
- CG3. Resolver problemas de tipo químico.
- CG5. Trabajo en equipo que tenga un objetivo químico o interdisciplinar
- CG6. Trabajo en un contexto internacional con grupos o laboratorios que tengan una línea o tema de trabajo químico conjunto.
- CG7. Habilidades en las relaciones interpersonales en el ámbito profesional como químico.
- CG9. Razonamiento crítico en cualquier tema de tipo químico, en particular, o científico en general que repercuta en las posibles soluciones del problema.
- CG10. Aprendizaje autónomo así como capacidad de desarrollar nuevos proyectos, temas o líneas a partir de una base química ya existente.
- CG12. Creatividad en los planteamientos y en las soluciones a temas y problemas de carácter químico que puedan surgir durante cualquier etapa del desarrollo del aprendizaje.
- CG14. Motivación por la calidad en cualquier tipo de actividad a realizar, inculcando el trabajo científico metodológico, detallado y solvente.
- CE1. Aspectos principales de terminología química, nomenclatura, convenios y unidades.



- CE2. Variación de las propiedades características de los elementos químicos según la Tabla Periódica.
- CE3. Características de los diferentes estados de la materia y las teorías empleadas para describirlos.
- CE8. Estudio de las técnicas analíticas (electroquímicas, ópticas,...) y sus aplicaciones.
- CE11. Relación entre propiedades macroscópicas y propiedades de átomos y moléculas individuales: incluyendo macromoléculas (naturales y sintéticas), polímeros, coloides y otros materiales.
- CE13. Capacidad para demostrar el conocimiento y comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionadas con las áreas de la Química.
- CE14. Resolución de problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados.
- CE15. Reconocer y analizar nuevos problemas y planear estrategias para solucionarlos.
- CE16. Evaluación, interpretación y síntesis y datos e información Química.

### 4.3 Competencias transversales y de materia

- Competencia 1. Conocer los principios de la Mecánica Cuántica y su aplicación a la descripción de las propiedades de los átomos, las moléculas y los sólidos.
- Competencia 2. Tener conocimientos que permitan aplicar la termodinámica estadística para estudiar el comportamiento macroscópico de la materia a partir de las propiedades microscópicas.
- Competencia 3. Conocer el origen de los fenómenos espectroscópicos y el fundamento cuántico de las diferentes técnicas para la determinación de los diversos parámetros estructurales moleculares
- Competencia 4. Conocer la importancia de la Química Física y su impacto en la sociedad industrial y tecnológica.
- Competencia 5. CT1: Ser capaz de expresarse correctamente en lengua castellana en su ámbito disciplinar
- Competencia 6. CT3: Ser capaz de gestionar la información y el conocimiento en su ámbito disciplinar, incluyendo saber utilizar como usuario las herramientas básicas en TIC
- Competencia 7. CT4: Considerar la ética y la integridad intelectual como valores esenciales de la práctica profesional
- Competencia 8. CT5: Ser capaz de proyectar los conocimientos, habilidades y destrezas adquiridos para promover una sociedad basada en los valores de la libertad, la justicia, la igualdad y el pluralismo
- Competencia 9. CT6: Ser capaz de trabajar en equipo y relacionarse con otras personas del mismo o distinto ámbito profesional
- Competencia 10. CT7: Desarrollar habilidades de iniciación a la investigación

## 5. Contenidos

### TEMA 1. Introducción a la Química Cuántica

Probabilidad. Mecánica Cuántica. Función de estado. Operadores. El principio de incertidumbre.

### TEMA 2. Modelos cuánticos útiles en Química

La partícula en una caja. La partícula en un anillo. La partícula en una esfera.

### TEMA 3. Átomos hidrogenoides

Hamiltoniano. Niveles de energía. Orbitales atómicos. El espín electrónico.

### TEMA 4. Tratamientos aproximados en Mecánica Cuántica

Método de variaciones. Teorema de variaciones. Función variacional lineal. Teoría de perturbaciones.



### TEMA 5. Átomos polieletrónicos

Funciones de onda espín-orbitales. Determinantes de Slater. Tratamientos aproximados. Aproximación de Hartree-Fock. Configuraciones electrónicas.

### TEMA 6. Espectroscopía atómica

Radiación electromagnética. Interacción radiación-materia. Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo. Probabilidad de transición. Espectroscopía atómica.

### TEMA 7. Enlace químico

Química Cuántica. Teoría del Enlace de Valencia. Orbitales Moleculares.

### TEMA 8. Oscilador armónico

Curva de energía potencial. Tratamiento clásico. Tratamiento cuántico.

### TEMA 9. Espectroscopía molecular

Moléculas diatómicas. Momento dipolar eléctrico. Espectro rotacional puro. Espectro rovibracional. Moléculas poliatómicas. Modos normales de equilibrio.

## 6. Metodología Docente

Actividad Formativa	Metodología	Horas Presenciales	Trabajo Autónomo	Volumen de trabajo
Magistrales	Desarrollo en el aula del temario de la asignatura	45	67.5	112.5
Seminarios	Propuesta y resolución por el profesor de problemas en el aula	8	12	20.0
Tutorías	Resolución por los alumnos de ejercicios propuestos en el aula	4	4	8.0
Evaluación	Estimación de los conocimientos adquiridos mediante pruebas escritas.	3	6.5	9.5
	Total	60	90	150

## 7. Horario de la asignatura

<https://www.um.es/web/estudios/grados/quimica/2023-24#horarios>



## 8. Sistema de Evaluación

Métodos / Instrumentos	Pruebas escritas (exámenes): pruebas objetivas, de desarrollo, de respuesta corta, de ejecución de tareas, de escala de actitudes realizadas por los alumnos para mostrar los conocimientos teóricos y prácticos adquiridos.
Criterios de Valoración	Esta prueba constará de cuestiones teóricas y problemas.
Ponderación	75
Métodos / Instrumentos	Procedimientos de observación del trabajo del estudiante: registros de participación, de realización de actividades, cumplimiento de plazos, participación en foros
Criterios de Valoración	La participación en las tutorías y la correcta resolución de los ejercicios/problemas que en ellas se planteen.
Ponderación	25

### Fechas de exámenes

<https://www.um.es/web/estudios/grados/quimica/2023-24#examenes>

## 9. Resultados del Aprendizaje

Conocer los principios de la Mecánica Cuántica y su aplicación a la descripción de las propiedades de los átomos, las moléculas y los sólidos.

Conocer el origen de los fenómenos espectroscópicos y el fundamento cuántico de las diferentes técnicas para la determinación de los diversos parámetros estructurales moleculares.




Conocer y manejar adecuadamente técnicas experimentales espectroscópicas, electroquímicas y de medidas de fenómenos de transporte







## 10. Bibliografía

### Grupo 1

#### Bibliografía Básica

-  Ira N. Levine, "Química Cuántica", 5 edición, Prentice Hall
-  A.Requena y J.Zuñiga,"Espectroscopía", Pearson, Prentice Hall
-  - Ira N. Levine, "Fisicoquímica", 5 edición, McGraw Hill

#### Bibliografía Complementaria

-  Thomas Engel y Phiip Reid, "Química Física", Pearson, AddisonWesley
-  M.Díaz Peña y A.Roig Muntaner, "Química Física", Ed. Alhambra
-  P.Atkins y J.de Paula, "Química Física", Ed.Panamericana
-  J.Simons and J.Nichols, "Quantum Mechanics in Chemistry", Oxford.

### Grupo 9(IC)

No se ha publicado bibliografía para este grupo.

## 11. Observaciones y recomendaciones

### Clases de teoría

Durante las clases de teoría en el aula no estará permitido el uso por parte de los alumnos de ordenadores portátiles, teléfonos o dispositivos similares que puedan distraer su atención.



El inglés es el idioma de comunicación científica. Saber escribir, leer y hablar en inglés es esencial para comprender, aprender y comunicar la Ciencia. El reconocimiento de nuestros Grados con Sellos Internacionales de Calidad (Eur-ACE para el Grado en Ingeniería Química, y Eurobachelor para el Grado en Química) exige que los alumnos deben adquirir competencias y destrezas en inglés para todas nuestras materias. Por ello en esta asignatura, se facilitará material docente en inglés.

Descripción detallada del desarrollo de las Evaluaciones.

Durante los exámenes y tutorías, los alumnos que las lleven consigo podrán utilizar copias de las transparencias utilizadas por el profesor en las clases de teoría. Dichas copias no deben de tener sobreescrita ninguna anotación.

Convocatoria de Febrero.

Se realizará una evaluación continua de los progresos y del trabajo desarrollado a lo largo del curso, que se basará en cuestiones y problemas propuestos por el profesor y que serán resueltos por los alumnos durante las tutorías. La nota obtenida en este apartado constituirá un 25% de la nota final, siempre y cuando, el alumno haya asistido y participado activamente en estas actividades. El restante 75% será evaluado mediante un examen escrito.

Convocatorias restantes del mismo curso académico.

En las restantes convocatorias del mismo curso académico, los alumnos deberán realizar un examen escrito de contenidos y dificultad similares al de la convocatoria de Febrero. En dicho examen los alumnos dispondrán de las calificaciones obtenidas en las Tutorías en la convocatoria de Febrero. Cada alumno elegirá mantener las calificaciones de dicha actividad, con igual porcentaje que en la convocatoria de febrero, o bien que dicha actividad pase a ser evaluada mediante el examen.

Necesidades educativas especiales

Aquellos estudiantes con discapacidad o necesidades educativas especiales pueden dirigirse al Servicio de Atención a la Diversidad y Voluntariado (ADYV; <http://www.um.es/adyv/>) para recibir la orientación o asesoramiento oportunos para un mejor aprovechamiento de su proceso formativo. De igual forma podrán solicitar la puesta en marcha de las adaptaciones curriculares individualizadas de contenidos, metodología y evaluación necesarias que garanticen la igualdad de oportunidades en su desarrollo académico. El tratamiento de la información sobre este alumnado, en cumplimiento con la LOPD, es de estricta confidencialidad.

ODS





Esta asignatura no tiene vinculación con los Objetivos de Desarrollo Sostenible (ODS). Sin embargo, proporciona conocimientos básicos necesarios para su cumplimiento.