UNIVERSIDAD DE MURCIA

1. Identificación

1.1. De la asignatura

Curso Académico	2024/2025
Titulación	GRADO EN QUÍMICA 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 TERCERO
Carácter	OBLIGATORIA
Número de grupos	2
Créditos ECTS	6.0
Estimación del volumen de trabajo	150.0 150.0
Organización temporal	1º Cuatrimestre 1º Cuatrimestre
Idiomas en que se imparte	Español

1.2. Del profesorado: Equipo docente

BASTIDA PASCUAL, ADOLFO

Docente: **GRUPO 1, GRUPO PCEO QUIM+ING QUIM**

Coordinación de los grupos: **GRUPO 1, GRUPO PCEO QUIM+ING QUIM**

Coordinador de la asignatura

Categoría
CATEDRATICOS DE UNIVERSIDAD

Área
QUÍMICA FÍSICA

Departamento
QUÍMICA FÍSICA

Correo electrónico / Página web / Tutoría electrónica
bastida@um.es https://webs.um.es/bastida/MM/index-MM.html Tutoría electrónica: **Sí**

Teléfono, horario y lugar de atención al alumnado

Duración:	Día:	Horario:	Lugar:
A	Martes	08:00-10:00	868887479, Facultad de Química B1.1A.043
Observaciones: No consta			
Duración:	**Día:**	**Horario:**	**Lugar:**
A	Jueves	08:00-10:00	868887479, Facultad de Química B1.1A.043
Observaciones: No consta			

2. Presentación

El objetivo de la asignatura Química Física I es que el alumno de Química adquiera las prin-cipales 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 descrip-ción 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 constan

3.2. Requisitos

No constan

3.3. 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 mis-mas 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.
- CE6: Estudio de los elementos químicos y sus compuestos. Obtención, estructura y reactividad.
- CE7: Propiedades de los compuestos orgánicos, inorgánicos y órgano metálicos.
- CE8: Estudio de las técnicas analíticas (electroquímicas, ópticas,...) y sus aplicaciones.
- CE9: Operaciones unitarias de Ingeniería Química.
- CE10: Metrología de los procesos químicos incluyendo la gestión de calidad.
- 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.
- CE17: Manipular con seguridad materiales químicos.
- CE18: Llevar a cabo procedimientos estándares de laboratorios implicados en trabajos analíticos y sintéticos, en relación con sistemas orgánicos e inorgánicos.
- CE19: Manejo de instrumentación química estándar como la que se utiliza para investigaciones estructurales y separaciones.
- CE20: Interpretación de datos procedentes de observaciones y medidas en el laboratorio en términos de su significación y de las teorías que la sustentan.
- CE21: Valoración de riesgos en el uso de sustancias químicas y procedimientos de laboratorio.
- CE22: Equilibrio entre teoría y experimentación.
- CE23: Reconocer y valorar los procesos químicos en la vida diaria.
- CE24: Comprensión de los aspectos cualitativos y cuantitativos de los problemas químicos.
- CE25: Capacidad para relacionar la Química con otras disciplinas.

4.3. Competencias transversales y de materia

- Conocer los principios de la Mecánica Cuántica y su aplicación a la descripción de las propiedades de los átomos, las moléculas y los sólidos
- Tener conocimientos que permitan aplicar la termodinámica estadística para estudiar el comportamiento macroscópico de la materia a partir de las propiedades microscópicas
- 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 la importancia de la Química Física y su impacto en la sociedad industrial y tecnológica
- CT1: Ser capaz de expresarse correctamente en lengua castellana en su ámbito disciplinar
- CT3: Ser capaz de gestionar la información y el conocimiento en su ámbito disciplinar, incluyendo saber utilizar como usuario las herramientas básicas en TIC
- CT4: Considerar la ética y la integridad intelectual como valores esenciales de la práctica profesional
- 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
- CT6: Ser capaz de trabajar en equipo y relacionarse con otras personas del mismo o distinto ámbito profesional
- CT7: Desarrollar habilidades de iniciación a la investigación

5. Contenidos

5.1. Teoría

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 polielectrónicos

Funciones de onda expín-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 Tratamieno clásico Tratamiento cuántico

Tema 9: Espectrocopía molecular

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

5.2. Prácticas

No constan

6. Actividades Formativas

Actividad Formativa	Metodología	Horas	Presencialidad
AF1: Asistencia y participación en clases teóricas.		45.0	100.0
AF2: Asistencia y participación en seminarios/talleres.		8.0	100.0

AF7: Asistencia y participación en tutoría ECTS.	4.0	100.0
AF8: Realización de las pruebas de evaluación	3.0	100.0
AF9: Trabajo autónomo	90.0	0.0
Totales	150,00	

7. Horario de la asignatura

https://www.um.es/web/estudios/grados/quimica/2024-25#horarios

8. Sistemas de Evaluación

Identificador	Denominación del instrumento de evaluación	Criterios de Valoración	Ponderación
SE1	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.	Esta prueba constará de cuestiones teóricas y problemas	75.0
SE3	Informes escritos, trabajos y proyectos: trabajos escritos, portafolios, etc., con independencia de que se realicen individual o grupalmente.		0.0
SE6	Procedimientos de observación del trabajo del estudiante: registros de participación, de realización de actividades, cumplimiento de plazos, participación en foros	La participación en las tutorías y la correcta resolución de los ejercicios /problemas que en ellas se planteen	25.0

9. Fechas de exámenes

https://www.um.es/web/estudios/grados/quimica/2024-25#examenes

10. 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 es-
tructurales moleculares

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

11. Bibliografía

Grupo: GRUPO 1

Bibliografía básica

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

Bibliografía complementaria

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

Grupo: GRUPO PCEO QUIM+ING QUIM

Bibliografía básica

No constan

Bibliografía complementaria

No constan

12. Observaciones

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 podrán dirigirse al Servicio de Atención a la Diversidad y Voluntariado (ADYV - https://www.um.es/adyv) para recibir orientación sobre un mejor aprovechamiento de su proceso formativo y, en su caso, la adopción de medidas de equiparación y de mejora para la inclusión, en virtud de la Resolución Rectoral R-358/2016. El tratamiento de la información sobre este alumnado, en cumplimiento con la LOPD, es de estricta confidencialidad.

REGLAMENTO DE EVALUACIÓN DE ESTUDIANTES

El artículo 8.6 del Reglamento de Evaluación de Estudiantes (REVA) prevé que "salvo en el caso de actividades definidas como obligatorias en la guía docente, si el o la estudiante no puede seguir el proceso de evaluación continua por circunstancias sobrevenidas debidamente justificadas, tendrá derecho a realizar una prueba global".

Se recuerda asimismo que el artículo 22.1 del Reglamento de Evaluación de Estudiantes (REVA) estipula que "el o la estudiante que se valga de conductas fraudulentas, incluida la indebida atribución de identidad o autoría, o esté en posesión de medios o instrumentos que faciliten dichas conductas, obtendrá la calificación de cero en el procedimiento de evaluación y, en su caso, podrá ser objeto de sanción, previa apertura de expediente disciplinario".