



# Guía Docente:

## QUÍMICA FÍSICA I

---



**FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS**  
**UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID**  
**CURSO 2011-2012**



## I.- IDENTIFICACIÓN

<b>NOMBRE DE LA ASIGNATURA:</b>	<b>Química Física I</b>
<b>CARÁCTER:</b>	<b>Obligatoria</b>
<b>MATERIA:</b>	<b>Química Física</b>
<b>MÓDULO:</b>	<b>Fundamental</b>
<b>TITULACIÓN:</b>	<b>Grado en Química</b>
<b>SEMESTRE/CUATRIMESTRE:</b>	<b>Anual (segundo curso)</b>
<b>DEPARTAMENTO/S:</b>	<b>Química Física I</b>

### PROFESOR/ES RESPONSABLE/S:

<b>Coordinador de la asignatura</b>	<b>Profesor:</b> JOSÉ LUÍS FERNÁNDEZ ABASCAL <b>Departamento:</b> Química Física I <b>Despacho:</b> QB-249 <b>e-mail:</b> <a href="mailto:abascal@quim.ucm.es">abascal@quim.ucm.es</a>
<b>Coordinador del laboratorio</b>	<b>Profesor:</b> FRANCISCO ORTEGA GÓMEZ <b>Departamento:</b> Química Física I <b>Despacho:</b> QB-212 <b>e-mail:</b> <a href="mailto:fortega@quim.ucm.es">fortega@quim.ucm.es</a>

<b>Grupo A</b>	
<b>1<sup>er</sup> cuatrimestre</b> <b>Teoría</b> <b>Seminario</b>	<b>Profesor:</b> JOSÉ LUÍS FERNÁNDEZ ABASCAL <b>Departamento:</b> Química Física I <b>Despacho:</b> QB-249 <b>e-mail:</b> <a href="mailto:abascal@quim.ucm.es">abascal@quim.ucm.es</a>
<b>2<sup>o</sup> cuatrimestre</b> <b>Teoría</b> <b>Seminario</b>	<b>Profesora:</b> GLORIA TARDAJOS RODRÍGUEZ <b>Departamento:</b> Química Física I <b>Despacho:</b> QA-245 <b>e-mail:</b> <a href="mailto:tardajos@quim.ucm.es">tardajos@quim.ucm.es</a>
<b>Tutoría</b>	<b>Profesor:</b> JOSÉ LUÍS FERNÁNDEZ ABASCAL <b>Departamento:</b> Química Física I <b>Despacho:</b> QB-249 <b>e-mail:</b> <a href="mailto:abascal@quim.ucm.es">abascal@quim.ucm.es</a>
<b>Tutoría</b>	<b>Profesora:</b> GLORIA TARDAJOS RODRÍGUEZ <b>Departamento:</b> Química Física I <b>Despacho:</b> QA-245 <b>e-mail:</b> <a href="mailto:tardajos@quim.ucm.es">tardajos@quim.ucm.es</a>



<b>Grupo B</b>		
<b>1<sup>er</sup> cuatrimestre</b> Teoría Seminario	<b>Profesor:</b> <b>Departamento:</b> <b>Despacho:</b> <b>e-mail:</b>	IGNACIO SOLÁ REIJA Química Física I QB-202 <a href="mailto:isola@quim.ucm.es">isola@quim.ucm.es</a>
<b>2<sup>o</sup> cuatrimestre</b> Teoría Seminario	<b>Profesor:</b> <b>Departamento:</b> <b>Despacho:</b> <b>e-mail:</b>	LUIS GONZÁLEZ MACDOWELL Química Física I QB-237 <a href="mailto:luis@ender.quim.ucm.es">luis@ender.quim.ucm.es</a>
<b>Tutoría</b>	<b>Profesor:</b> <b>Departamento:</b> <b>Despacho:</b> <b>e-mail:</b>	IGNACIO SOLÁ REIJA Química Física I QB-202 <a href="mailto:isola@quim.ucm.es">isola@quim.ucm.es</a>

<b>Grupo C</b>		
<b>1<sup>er</sup> cuatrimestre</b> Teoría Seminario	<b>Profesor:</b> <b>Departamento:</b> <b>Despacho:</b> <b>e-mail:</b>	JUAN ENRIQUE VERDASCO COSTALES Química Física I QA-243 <a href="mailto:verdasco@quim.ucm.es">verdasco@quim.ucm.es</a>
<b>2<sup>o</sup> cuatrimestre</b> Teoría Seminario	<b>Profesor:</b> <b>Departamento:</b> <b>Despacho:</b> <b>e-mail:</b>	MANUEL GIL CRIADO Química Física I QA-249 <a href="mailto:mangil@quim.ucm.es">mangil@quim.ucm.es</a>
<b>Tutoría</b>	<b>Profesor:</b> <b>Departamento:</b> <b>Despacho:</b> <b>e-mail:</b>	JUAN ENRIQUE VERDASCO COSTALES Química Física I QA-243 <a href="mailto:verdasco@quim.ucm.es">verdasco@quim.ucm.es</a>
<b>Tutoría</b>	<b>Profesor:</b> <b>Departamento:</b> <b>Despacho:</b> <b>e-mail:</b>	MANUEL GIL CRIADO Química Física I QA-249 <a href="mailto:mangil@quim.ucm.es">mangil@quim.ucm.es</a>

<b>Grupo D</b>		
<b>1<sup>er</sup> cuatrimestre</b> Teoría Seminario	<b>Profesor:</b> <b>Departamento:</b> <b>Despacho:</b> <b>e-mail:</b>	MARTA MENÉNDEZ CARBAJOSA Química Física I QA-244 <a href="mailto:menendez@quim.ucm.es">menendez@quim.ucm.es</a>
<b>2<sup>o</sup> cuatrimestre</b> Teoría Seminario	<b>Profesora:</b> <b>Departamento:</b> <b>Despacho:</b> <b>e-mail:</b>	NEREA IZA CABO Química Física I QA-247 <a href="mailto:nereaiza@quim.ucm.es">nereaiza@quim.ucm.es</a>
<b>Tutoría</b>	<b>Profesora:</b> <b>Departamento:</b> <b>Despacho:</b> <b>e-mail:</b>	MARTA MENÉNDEZ CARBAJOSA Química Física I QA-244 <a href="mailto:menendez@quim.ucm.es">menendez@quim.ucm.es</a>



<b>Tutoría</b>	<b>Profesora:</b> GLORIA TARDAJOS RODRÍGUEZ <b>Departamento:</b> Química Física I <b>Despacho:</b> QA-245 <b>e-mail:</b> <a href="mailto:tardajos@quim.ucm.es">tardajos@quim.ucm.es</a>
<b>Tutoría</b>	<b>Profesor:</b> JOSÉ LUIS FERNÁNDEZ ABASCAL <b>Departamento:</b> Química Física I <b>Despacho:</b> QB-249 <b>e-mail:</b> <a href="mailto:abascal@quim.ucm.es">abascal@quim.ucm.es</a>

<b>Grupo E</b>	
<b>1<sup>er</sup> cuatrimestre</b> <b>Teoría</b> <b>Seminario</b>	<b>Profesor:</b> JOSÉ TORTAJADA PÉREZ <b>Departamento:</b> Química Física I <b>Despacho:</b> QA-512 <b>e-mail:</b> <a href="mailto:jtp@quim.ucm.es">jtp@quim.ucm.es</a>
<b>2<sup>o</sup> cuatrimestre</b> <b>Teoría</b> <b>Seminario</b>	<b>Profesor:</b> ALFREDO LAINEZ FERRANDO <b>Departamento:</b> Química Física I <b>Despacho:</b> QB-236 <b>e-mail:</b> <a href="mailto:alfredo.lainez@quim.ucm.es">alfredo.lainez@quim.ucm.es</a>
<b>Tutoría</b>	<b>Profesor:</b> PEDRO GÓMEZ CALZADA <b>Departamento:</b> Química Física I <b>Despacho:</b> QA-506 <b>e-mail:</b> <a href="mailto:pgomez@quim.ucm.es">pgomez@quim.ucm.es</a>
<b>Tutoría</b>	<b>Profesor:</b> JESÚS FERNÁNDEZ CASTILLO <b>Departamento:</b> Química Física I <b>Despacho:</b> QA-241 <b>e-mail:</b> <a href="mailto:jfernand@quim.ucm.es">jfernand@quim.ucm.es</a>

## II.- OBJETIVOS

### ■ OBJETIVO GENERAL

En esta asignatura se pretende transmitir al alumno los conceptos fundamentales de química cuántica y espectroscopía que un graduado en química necesita. Se introducirán los conceptos y las herramientas mecano-cuánticas necesarias para estudiar de forma cuantitativa los átomos y las moléculas. Se abordará el estudio de los conceptos básicos de las espectroscopias moleculares más utilizadas y su aplicación práctica para la obtención de información molecular, determinación de estructuras moleculares, etc.

Un objetivo general, de vital importancia, es el de inculcar en el alumno una concepción cuantitativa de la Química; en este sentido es fundamental transmitir al alumno el papel que la Química Física desempeña en la Química, no sólo como conjunto de conceptos, teorías y herramientas experimentales y de cálculo, capaces de explicar los objetos y fenómenos que atañen a la Química, sino como motor de la ciencia y la tecnología química.



### ■ OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Conocer los conceptos fundamentales de la mecánica cuántica y sus orígenes.
- Capacitar al alumno para explicar cuantitativamente la estructura y espectroscopia atómica, así como las configuraciones electrónicas y la construcción de la tabla periódica de los elementos.
- Entender el enlace químico y la estructura molecular, y cómo es posible describirla de forma cuantitativa, tanto en moléculas diatómicas como poliatómicas.
- Introducir al alumno en los métodos aproximados que se utilizan en modelización molecular.
- Aprender los conceptos y herramientas básicas de la teoría de grupos y simetría y su aplicación en el enlace químico.
- Conocer los conceptos fundamentales de las espectroscopias moleculares (rotación, vibración, Raman y electrónica) y su aplicación en química.
- Conocer los conceptos fundamentales de las espectroscopias de resonancia magnética (nuclear y electrónica) y su aplicación en química.
- Utilizar software de modelización molecular para optimizar geometrías y obtener propiedades moleculares y espectros vibracionales, electrónicos y de resonancia magnética nuclear.
- Aprender a utilizar la teoría de grupos y simetría para explicar aspectos de la espectroscopia molecular.
- Utilizar la información combinada de las distintas espectroscopias y de modelado molecular para la determinación de estructuras moleculares.

## III.- CONOCIMIENTOS PREVIOS Y RECOMENDACIONES

### ■ CONOCIMIENTOS PREVIOS:

Ninguno

### ■ RECOMENDACIONES:

Se recomienda haber superado las materias básicas *Física General*, *Matemáticas*, *Química General*, *Informática Aplicada a la Química* y *Operaciones Básicas de laboratorio*.

## IV.- CONTENIDOS

### ■ BREVE DESCRIPCIÓN DE LOS CONTENIDOS:

Orígenes de la teoría cuántica. Ecuación de Schrödinger. Aplicación a sistemas sencillos. Estructura atómica. Estructura molecular y enlace químico. Moléculas diatómicas. Moléculas poliatómicas. Modelización molecular. Teoría de grupos y simetría. Interacción materia-radiación. Fundamentos de Espectroscopía. Espectroscopias de microondas, infrarroja, Raman y visible-ultravioleta. Fluorescencia y fosforescencia. Espectroscopias de resonancia magnética (RMN y RSE).

**PROGRAMA:****TEMA I. Fundamentos****Lección 1: Comportamiento cuántico de la materia**

Fenómenos de ondas y energía de la radiación. Ley de Planck: cuantización de la energía. Espectro fotoeléctrico: concepto de fotón. Espectros atómicos. Carácter ondulatorio de la materia: hipótesis de De Broglie.

**Lección 2: Mecánica ondulatoria**

Ecuación de Schrödinger: dependiente e independiente del tiempo. Estados estacionarios. Concepto de función de onda para una partícula: interpretación de Born.

**Lección 3: Formalismo de la Mecánica Cuántica**

Concepto de operador y observables. Ecuación de valores propios: funciones propias y valores propios. El operador Hamiltoniano. Valores esperados. Observables compatibles e incompatibles. La relación de incertidumbre de Heisenberg.

**Lección 4: Movimiento de traslación de una partícula**

Energía de una partícula confinada en una caja de una dimensión. Cuantización de la energía. La partícula libre como caso límite cuando la longitud tiende al infinito. Partícula en una caja de potencial 3D: degeneración.

**Lección 5: Sistema de dos partículas I: movimiento vibracional**

El oscilador armónico como modelo de vibración de una molécula. Repaso del oscilador clásico. Solución de la ecuación de Schrödinger: Niveles de energía. Propiedades de las funciones de onda. Teorema del virial.

**Lección 6: Sistema de dos partículas II: movimiento rotacional**

Repaso del movimiento clásico de rotación: momento angular. Caso mecano-cuántico. Conmutación de las componentes del momento angular. Solución de la ecuación de Schrödinger: Armónicos esféricos. Representación de los armónicos esféricos. El rotor rígido como modelo de la rotación molecular.

*Tutoría dirigida 1: Operadores*

*Tutoría dirigida 2: Partícula en la caja*

*Tutoría dirigida 3: Rotación – Momento angular*

*Laboratorio 1: Teoría de Grupos y simetría I*

**TEMA II. Estructura Atómica****Lección 7: El átomo de hidrógeno**

Planteamiento de la ecuación de Schrödinger. Potencial central. Descomposición de la ecuación en parte radial y parte angular. Barrera centrífuga y potencial efectivo. Números cuánticos. Funciones radiales y valores propios de la energía: orbitales atómicos. Degeneración de los niveles de energía. Momento magnético: experimento de Stern-Gerlach. Momento angular de espín. Momento angular total.

**Lección 8: Átomos polielectrónicos I**

Repulsión electrónica. Indiscernibilidad de partículas idénticas: antisimetría de la función de onda de electrones. Funciones de orden cero para el estado fundamental del



átomo de He: producto antisimetrizado de funciones unielectrónicas. Principio de Pauli. Determinantes de Slater. Método variacional. Cargas nucleares efectivas. Método de variación lineal de coeficientes. Refinamientos en el cálculo de la energía y función de onda en el He: las configuraciones electrónicas son una aproximación. Método de Campo Autoconsistente (SCF). Expresiones del método de Hartree-Fock. Energía de los orbitales y configuraciones electrónicas. Propiedades periódicas.

### **Lección 9: Átomos polielectrónicos II**

Acoplamiento de momentos angulares. Esquema de acoplamiento LS. Términos electrónicos. Electrones no equivalentes y equivalentes. Principio de Hund: la energía de un estado depende del momento angular orbital y de espín electrónico. Momento angular total. Interacción espín-órbita. Reglas de selección en espectroscopia atómica.

*Tutoría dirigida 4: Átomo de hidrógeno*

## **TEMA III. Estructura Molecular y Enlace Químico**

### **Lección 10: La molécula más simple**

Separación Born-Oppenheimer y Hamiltoniano electrónico. Orbitales moleculares. Método de combinación lineal de orbitales moleculares (CLOA). Ejemplo del método variacional. Energías de los orbitales moleculares más simples para el  $H_2^+$ . Densidades de carga y carácter enlazante o antienlazante de la función de onda.

### **Lección 11: Moléculas diatómicas**

El hamiltoniano para la molécula de  $H_2$ . El término de repulsión electrónica. Orbitales moleculares como CLOA. Configuraciones electrónicas moleculares. Moléculas diatómicas del primer periodo: orden de enlace, energías de disociación y propiedades físicas. Términos electrónicos moleculares. El método CLOA no funciona en el límite de disociación: correlación electrónica. Interacción de configuraciones. Moléculas heteronucleares de átomos similares. Moléculas heteronucleares de átomos muy diferentes: casos del HF y LiH. El límite del enlace iónico.

### **Lección 12: Moléculas poliatómicas sencillas**

Geometría molecular y estructura electrónica. Moléculas triatómicas lineales:  $BeH_2$ . Orbitales moleculares canónicos. Orbitales moleculares localizados. Orbitales híbridos  $sp$ . Moléculas triatómicas no lineales:  $H_2O$ . Orbitales moleculares de simetría. Diagramas de Walsh. Hibridación en moléculas poliatómicas. Aproximación  $\pi$ -electrónica: el método de Hückel.

### **Lección 13: Modelización molecular**

Introducción a los métodos de modelización molecular. Métodos de Mecánica Molecular. Métodos *ab initio* y semiempíricos. Orbitales moleculares como desarrollo en funciones de base. Descripción de las bases empleadas más comunes: STOs, GTOs. Introducción al método de Hartree-Fock. Métodos semiempíricos más empleados. Energía de los orbitales moleculares y del estado electrónico de la molécula. Análisis de la distribución de carga. Geometría molecular y vibraciones moleculares. Estados de transición. Correlación electrónica. Más allá de Hartree-Fock.

*Tutoría dirigida 5: El método de Hückel*

*Laboratorio 2: Teoría de grupos y simetría II*

*Laboratorio 3: Teoría de grupos y simetría III*



*Laboratorio 4: Modelización Molecular I*

*Laboratorio 5: Modelización Molecular II*

#### **TEMA IV. Espectroscopia**

##### **Lección 14: Introducción a la Espectroscopia Molecular**

Espectro electromagnético: tipos de espectroscopias. Interacción materia-radiación: absorción, emisión espontánea y emisión estimulada. Coeficientes de Einstein y tiempos de vida media. Momentos de transición y reglas de selección de dipolo eléctrico. Intensidad de una transición espectral. Transmitancia, absorbancia, intensidad integrada y fuerza del oscilador. Ley de Lambert-Beer. Anchura de las líneas espectrales. Tipos de ensanchamiento: anchura natural, ensanchamiento por colisión y ensanchamiento Doppler.

##### **Lección 15: Aproximación de Born-Oppenheimer**

Separación de los movimientos electrónico y nuclear: aproximación de Born-Oppenheimer. Curvas y superficies de energía potencial. Energías de disociación y geometría molecular de mínima energía. Separación de los movimientos vibracional y rotacional: ecuaciones del oscilador armónico y rotor rígido. Energía vibro-rotacional.

##### **Lección 16: Espectroscopias de Resonancia Magnética**

Momento angular de espín y momento magnético. Estados de espín. Interacción espín-campo magnético. Espectroscopia de RMN: Desplazamiento químico y apantallamiento. Acoplamiento espín-espín. Fenómenos de relajación. Métodos experimentales. Aplicaciones de la espectroscopia de RMN. Espectroscopia de RSE.

##### **Lección 17: Espectroscopia de rotación**

Espectroscopia de microondas y de infrarrojo lejano: espectros de rotación pura. Moléculas diatómicas. Modelos de rotor rígido y elástico. Términos espectrales. Reglas de selección. Transiciones espectrales. Distribución de la intensidad de las líneas espectrales. Moléculas poliatómicas. Clasificación por los momentos de inercia. Moléculas lineales (rotor lineal), trompo-esféricas (rotor esférico), trompo-simétricas (rotor simétrico) y trompo-asimétricas (rotor asimétrico). Términos espectrales. Reglas de selección. Transiciones espectrales. Efecto Stark. Métodos experimentales. Aplicaciones de la espectroscopia de rotación. Determinación de estructuras moleculares.

##### **Lección 18: Espectroscopia de vibración**

Zonas de la región infrarroja: IR-cercano, IR-medio e IR-lejano. Vibración de moléculas diatómicas: anarmonicidad de las vibraciones. Espectros de vibración-rotación. Términos espectrales. Reglas de selección. Transiciones espectrales. Vibración de moléculas poliatómicas. Modos normales. Tratamiento mecano-cuántico de las vibraciones moleculares. Términos espectrales. Bandas fundamentales, sobretonos y bandas de combinación. Vibraciones paralelas y perpendiculares. Perfiles de las bandas de vibración-rotación. Influencia del espín nuclear en la intensidad relativa de las líneas de rotación. Métodos experimentales. Aplicaciones de la espectroscopia infrarroja.

##### **Lección 19: Espectroscopia Raman**

Efecto Raman: teorías clásica y cuántica. Polarizabilidad molecular. Espectros Raman de rotación pura de moléculas diatómicas y poliatómicas. Reglas de selección.





Transiciones espectrales. Espectros Raman de vibración-rotación de moléculas diatómicas y poliatómicas. Reglas de selección. Transiciones espectrales. Polarización de las líneas Raman. Métodos experimentales. Aplicaciones de la espectroscopia Raman.

### **Lección 20: Espectroscopia electrónica**

Estados electrónicos moleculares: Transiciones electrónicas puras. Moléculas diatómicas: notación de estados. Reglas de selección. Estructura vibracional de una banda electrónica: principio de Frank-Condon. Moléculas poliatómicas: tipos de transiciones electrónicas. Transiciones vibrónicas. Vías de desactivación de estados electrónicos excitados: fluorescencia y fosforescencia. Fotodisociación y predisociación. Métodos experimentales. Espectroscopia fotoelectrónica. Aplicaciones de la espectroscopia electrónica.

**Tutoría dirigida 6:** *Espectroscopía RMN*  
**Tutoría dirigida 7:** *Espectros vibro-rotacionales*  
**Tutoría dirigida 8:** *Espectroscopía Raman*

**Laboratorio 6:** *Ley de Lambert-Beer. Coeficientes de Einstein*  
**Laboratorio 7:** *Teoría de grupos y simetría aplicada a la espectroscopia I*  
**Laboratorio 8:** *Teoría de grupos y simetría aplicada a la espectroscopia II*  
**Laboratorio 9:** *Espectroscopia infrarroja I*  
**Laboratorio 10:** *Espectroscopia infrarroja II*  
**Laboratorio 11:** *Espectroscopia UV-VIS*  
**Laboratorio 12:** *Fundamentos de láseres*  
**Laboratorio 13:** *Fotoquímica*  
**Laboratorio 14:** *Simulación y modelado de espectros de RMN*  
**Laboratorio 15:** *Determinación estructural I*  
**Laboratorio 16:** *Determinación estructural II*  
**Laboratorio 17:** *Determinación estructural III*

## **V.- COMPETENCIAS**

### ■ **GENERALES:**

Las competencias generales del título, CG1, CG2, CG3, CG5, CG6, CG7, CG8, CG9, CG10, CG11, CG12 y CG13, desarrolladas en el módulo fundamental, CG-MF, y que son de aplicación en esta asignatura son las siguientes:

- **CG1-MF1:** Reconocer los procesos químicos en la vida diaria.
- **CG2-MF1:** Relacionar la Química con otras disciplinas.
- **CG3-MF1:** Continuar sus estudios en áreas multidisciplinares.
- **CG5-MF1:** Demostrar el conocimiento y comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionadas con las áreas de la Química.
- **CG6-MF1:** Analizar y resolver problemas cualitativos y cuantitativos.
- **CG7-MF1:** Reconocer y analizar nuevos problemas y planear estrategias para solucionarlos.
- **CG8-MF1:** Consultar y utilizar información científica y técnica de forma eficaz.



- **CG9-MF1:** Demostrar conocimientos sobre materiales de laboratorio y habilidades prácticas.
- **CG10-MF1:** Manipular con seguridad materiales químicos.
- **CG10-MF2:** Reconocer y valorar los riesgos en el uso de sustancias químicas y procedimientos de laboratorio.
- **CG11-MF1:** Manejar instrumentación química estándar.
- **CG11-MF2:** Desarrollar la capacidad de aplicar las técnicas de caracterización de las especies químicas.
- **CG12-MF1:** Interpretar datos procedentes de observaciones y medidas en el laboratorio.
- **CG13-MF1:** Reconocer e implementar buenas prácticas científicas de medida y experimentación.

#### ■ ESPECÍFICAS:

Las competencias específicas de la Materia Química Física que son de aplicación en esta asignatura son las siguientes:

- **CE11-MFQF2:** Utilizar las principales técnicas instrumentales espectroscópicas empleadas en química y poder determinar a través del trabajo experimental la estructura molecular y propiedades estructurales de las moléculas.
- **CE11-MFQF3:** Relacionar las propiedades macroscópicas y las propiedades de átomos y moléculas individuales, incluyendo macromoléculas, polímeros, coloides y otros materiales.
- **CE12-MFQF1:** Describir los principios de la Mecánica Cuántica y aplicarlos a la descripción de las propiedades de los átomos, las moléculas y los sólidos.
- **CE12-MFQF2:** Explicar el origen de los fenómenos espectroscópicos y el fundamento cuántico de las diferentes técnicas para la determinación de los diversos parámetros estructurales moleculares.
- **CE13-MFQF3:** Manejar programas informáticos de cálculo de propiedades microscópicas de la materia, y de programas de simulación.

#### ■ TRANSVERSALES:

Las competencias transversales del título, CT1, CT2, CT3, CT5, CT6, CT7, CT11 y CT12, desarrolladas en el módulo fundamental, CT-MF, y que son de aplicación en esta asignatura son las siguientes:

- **CT1-MF1** Elaborar y escribir informes de carácter científico y técnico.
- **CT2-MF1** Cooperar con otros estudiantes mediante el trabajo en equipo.
- **CT3-MF1** Aplicar el razonamiento crítico y autocrítico.
- **CT5-MF1** Utilizar información química, bibliografía y bases de datos especializadas.
- **CT6-MF1** Identificar la importancia de la química en el contexto industrial, medioambiental y social.
- **CT7-MF1** Utilizar herramientas y programas informáticos para el tratamiento de resultados experimentales.



- **CT11-MF1** Desarrollar el aprendizaje autónomo.
- **CT12-MF1** Reconocer la problemática energética actual y su importancia.
- **CT12-MF2** Desarrollar la sensibilidad por temas medioambientales.

## VI. – HORAS DE TRABAJO Y DISTRIBUCIÓN POR ACTIVIDAD

Actividad	Presencial (horas)	Trabajo autónomo (horas)	Créditos
Clases teóricas	45	67,5	4,5
Seminarios	15	22,5	1,5
Tutorías / Trabajos dirigidos	8	12	0,8
Prácticas de laboratorio	51	49	4,0
Preparación de trabajos y exámenes	12	18	1,2
<b>Total</b>	<b>131</b>	<b>169</b>	<b>12</b>

## VII.- METODOLOGÍA

Los contenidos de la asignatura se presentan a los alumnos en clases presenciales, divididas en dos tipos:

Las denominadas **clases presenciales de teoría** se impartirán al grupo completo y en ellas se darán a conocer al alumno los contenidos fundamentales de la asignatura. Al comienzo de cada tema se expondrán claramente el programa y los objetivos principales del mismo. Al final del tema se hará un breve resumen de los conceptos más relevantes y se plantearán nuevos objetivos que permitirán interrelacionar contenidos ya estudiados con los del resto de la asignatura y con otras asignaturas afines. Durante la exposición de contenidos se propondrán problemas que ejemplifiquen los conceptos desarrollados o que sirvan de introducción a nuevos contenidos. Para facilitar la labor de seguimiento por parte del alumno de las clases presenciales se le proporcionará el material docente necesario, bien en fotocopia o en el Campus Virtual.

En las **clases presenciales de seminarios** se resolverán ejercicios y cuestiones que ejemplifiquen los contenidos desarrollados en las clases de teoría. Periódicamente se suministrará al alumno una relación de dichos problemas/ejercicios con el objetivo de que intente su resolución previa a las clases, lo que incluirá en algunos casos la consulta de información científica. El proceso de resolución de estos problemas se llevará a cabo mediante diferentes métodos: en algunos casos se propondrá al alumno la exposición en clase de la resolución de algunos de estos problemas, debatiéndose sobre el procedimiento seguido, el resultado obtenido y su significado. En otros casos se discutirán los resultados de los alumnos en grupos reducidos y, posteriormente, se llevará a cabo su puesta en común. Por último, algunos ejercicios serán recogidos por el profesor para su evaluación. Estas clases de teoría y seminario y el trabajo que conllevan desarrollan las competencias generales CG6-MF1, CG7-MF1 y CG8-MF1 y las transversales CT1-MF1, CT2-MF1, CT3-MF1, CT5-MF1 y CT7-MF1.



Durante el desarrollo del temario, tanto en las clases presenciales de teoría como en las de seminarios, el alumno adquirirá los conocimientos y la experiencia necesarios para satisfacer todas las competencias específicas a cubrir, CE11-MFQF2, CE11-MFQF3, CE12-MFQF1, CE12-MFQF2 y CE13-MFQF3 y la transversal CT11-MF1. Además, durante el desarrollo de las sesiones se hará especial énfasis en relacionar los aspectos estudiados con otras disciplinas y fenómenos químicos en la vida diaria, así como en su carácter multidisciplinar, lo que satisfará las competencias generales CG1-MF1, CG2-MF1 y CG3-MF1, y las transversales CT12-MF1 y CT12-MF2.

Se realizarán tutorías dirigidas tanto sobre temas directamente relacionados con los contenidos teóricos, para ampliar conocimientos y desarrollar habilidades, como sobre temas más transversales que permitan interrelacionar los contenidos de la asignatura con otros aspectos de interés para el químico. Algunas de éstas, como complemento al trabajo personal realizado por el alumno y para potenciar el desarrollo del trabajo en grupo, se propondrán para la **elaboración y presentación de trabajos**. Todo ello permitirá que el alumno ponga en práctica sus habilidades en la obtención de información, desarrollando habilidades relacionadas con la utilización crítica de información bibliográfica y bases de datos y el trabajo en equipo (CT2-MF1, CT3-MF1 y CT5-MF1). Además, cada grupo de trabajo podrá evaluar, de forma anónima, el tema desarrollado por otro grupo, de manera análoga a la revisión entre pares propia de las publicaciones científicas, lo que desarrollará el sentido crítico y autocrítico contemplado en la competencia transversal CT3-MF1. Este proceso deberá llevarse a cabo de manera previa a la exposición de cada uno de los grupos, de modo que los alumnos implicados introduzcan las correcciones pertinentes en la versión final del trabajo. El proceso de evaluación servirá para que los alumnos desarrollen capacidades de análisis crítico de trabajos científicos y sean capaces de corregir en sus propias elaboraciones los defectos que encuentren en los trabajos que evalúen.

El profesor programará **tutorías** con grupos reducidos de alumnos sobre cuestiones planteadas por el profesor o por los mismos alumnos. También estarán disponibles tutorías para alumnos que de manera individual deseen resolver las dudas que surjan durante el estudio. Estas tutorías se realizarán de forma presencial en los horarios indicados por cada profesor o, excepcionalmente, de modo virtual.

Se utilizará el Campus Virtual para permitir una comunicación fluida entre profesores y alumnos y como instrumento para poner a disposición de los alumnos el material que se utilizará en las clases tanto teóricas como de problemas. También podrá utilizarse como foro en el que se presenten algunos temas complementarios cuyo contenido, aunque importante en el conjunto de la materia, no se considere oportuno presentarlo en las clases presenciales. Por último, esta herramienta permitirá realizar ejercicios de autoevaluación mediante pruebas objetivas de respuesta múltiple de corrección automática, que permiten mostrar tanto al profesor como al alumno qué conceptos necesitan de un mayor trabajo para su aprendizaje.

Se realizará un laboratorio durante todo el curso con temáticas directamente relacionadas con los contenidos de la asignatura. Este laboratorio constará tanto de prácticas experimentales, donde se desarrollen específicamente las competencias generales (CG9-MF1, CG10-MF1, CG10-MF2, CG11-MF2, CG12-MF1 y CG13-MF1), como de prácticas de cálculo y de utilización de herramientas teóricas en las que se desarrollarán las competencias específicas (CE11-MFQF2, CE11-MFQF3, CE12-MFQF1, CE12-MFQF2 y CE13-MFQF3). Algunas prácticas se plantearán utilizando una metodología investigativa, de modo que se presenten a los alumnos problemas transversales para que ellos los resuelvan utilizando los conocimientos teóricos adquiridos y las herramientas experimentales y de cálculo disponibles en el laboratorio, siempre bajo la guía y



supervisión del profesor. Finalmente el alumno presentará informes científicos individuales y en grupo de algunas de las prácticas realizadas (CT1-MF1, CT2-MF2, CT3-MF3, CT5-MF1, CT7-MF1).

## VIII.- BIBLIOGRAFÍA

### ■ BÁSICA:

- Atkins, P. y de Paula, J.: "Química Física", 8ª Edición, Editorial Médica Panamericana, Buenos Aires, 2008

### ■ COMPLEMENTARIA:

- Bertrán Rusca, J.; Núñez Delgado, J. (coord.): "Química Física", Volumen I, Ariel Ciencia, 2002.
- Engel, T.; Reid, P.: "Química Física", Pearson Addison Wesley, Madrid, 2006.
- Levine, I. N.: "Fisicoquímica", 5ª ed., McGraw-Hill/Interamericana de España, Madrid, 2004.
- Berry, R. S.; Rice, S. A.; Ross, J.: "Physical Chemistry", 2<sup>nd</sup> ed., Oxford University Press, New York, 2000.
- McQuarrie, D. A.; Simon, J. D.: "Physical Chemistry: A Molecular Approach", University Science Book, 1997.
- Bertrán Rusca, J.; Núñez Delgado, J. (coord.): "Problemas de Química Física", Delta Publicaciones, 2007.

## IX.- EVALUACIÓN

El rendimiento académico del alumno y la calificación final de la asignatura se computarán de forma ponderada atendiendo a los siguientes porcentajes, que se mantendrán en todas las convocatorias:

### ■ EXÁMENES ESCRITOS:

**65%**

Convocatoria de junio: se realizarán dos exámenes parciales y un examen final, comunes a todos los grupos. Los alumnos que superen los dos exámenes parciales no estarán obligados a presentarse al examen final, aunque la compensación entre exámenes parciales requerirá una nota mínima de 4 sobre 10 en el examen parcial no superado; en cualquier caso, la nota mínima, en exámenes escritos, para superar la asignatura es de 4 sobre 10. Los exámenes constarán de preguntas y problemas sobre los contenidos aprendidos durante el curso, tanto en las clases teóricas y seminarios como tutorías dirigidas y laboratorios. En la convocatoria de septiembre se realizará un único examen final semejante al realizado en la convocatoria de junio.

Competencias evaluadas: CG1-MF1, CG2-MF1, CG3-MF1, CG5-MF1, CG6-MF1, CG7-MF1, CG8-MF1, CE11-MFQF2, CE12-MFQF1, CE12-MFQF2, CE13-MFQF3, CT3-MF1, CT7-MF1, CT11-MF1.

### ■ TRABAJO PERSONAL:

**15%**

La evaluación del trabajo de aprendizaje individual realizado por el alumno se llevará a cabo teniendo en cuenta los siguientes factores:



- Destreza del alumno en la resolución de los problemas y ejercicios propuestos, que se recogerán periódicamente en las clases presenciales.
- Valoración del trabajo realizado durante las tutorías en grupo programadas, de asistencia obligatoria, y a las cuales serán citados los alumnos periódicamente a lo largo del curso.
- Valoración de los trabajos propuestos en las tutorías programadas y realizados individualmente o en grupo por los alumnos.

La calificación obtenida por el alumno en junio por este concepto se mantendrá en la convocatoria de septiembre.

Competencias evaluadas: CG1-MF1, CG2-MF1, CG3-MF1, CG5-MF1, CG6-MF1, CG7-MF1, CG8-MF1, CE11-MFQF2, CE12-MFQF1, CE12-MFQF2, CE13-MFQF3, CT1-MF1, CT2-MF1, CT3-MF1, CT5-MF1, CT6-MF1, CT11-MF1, CT12-MF1, CT12-MF2.

#### ■ LABORATORIO:

20%

Los alumnos desarrollarán en grupos reducidos a lo largo del curso una serie de prácticas de laboratorio tanto de carácter experimental como de cálculo y de utilización de herramientas teóricas, siendo la asistencia a estas prácticas **obligatoria**. Se valorará la obtención por el alumno de habilidades teórico-prácticas, así como la destreza en la utilización de los equipos experimentales y en el manejo de paquetes informáticos de tratamiento de datos y modelización molecular. Para algunas de las prácticas los alumnos deberán realizar un informe científico, individualmente o en grupo, que será objeto de evaluación. Se realizará durante el laboratorio un examen tipo test que será considerado como un 20% de la calificación del laboratorio. En cualquier caso, la nota mínima de laboratorio necesaria para superar la asignatura es de 4 sobre 10.

La calificación obtenida por el alumno en junio por este concepto se mantendrá en la convocatoria de septiembre.

En aquellos casos en que un estudiante suspenda la asignatura pero haya superado las actividades presenciales del laboratorio, la nota de éstas se le mantendrá durante un año, debiendo hacerse, sin embargo, un examen de los contenidos del laboratorio para poder aprobar la asignatura.

Competencias evaluadas: CG6-MF1, CG7-MF1, CG8-MF1, CG9-MF1, CG10-MF1, CG10-MF2, CG11-MF1, CG11-MF2, CG12-MF1, CG13-MF1, CE11-MFQF2, CE13-MFQF3, CT1-MF1, CT2-MF1, CT3-MF1, CT5-MF1, CT7-MF1.

#### ■ ASISTENCIA Y PARTICIPACIÓN ACTIVA EN LAS CLASES:

La asistencia a todas las actividades presenciales es **obligatoria**, y la participación activa del alumno en todas las actividades docentes se valorará positivamente en la calificación final.



**PLANIFICACIÓN DE ACTIVIDADES – CRONOGRAMA 2011/2012**

TEMA	ACTIVIDAD	HORAS	GRUPOS	INICIO	FIN
<b>I. Fundamentos</b>	Clases Teoría	7	1	1ª Semana	5ª Semana
	Clases Problemas	3	1		
	Tutoría programada	3	3		
<b>II. Estructura Atómica</b>	Clases Teoría	6	1	6ª Semana	10ª Semana
	Clases Problemas	3	1		
	Tutoría programada	1	3		
	Laboratorio	3	4		
<b>III. Estructura Molecular y Enlace Químico</b>	Clases Teoría	11	1	10ª Semana	17ª Semana
	Clases Problemas	4	1		
	Tutoría programada	1	3		
	Laboratorio	12	4		
<b>IV. Espectroscopia</b>	Clases Teoría	18	1	18ª Semana	30ª Semana
	Clases Problemas	8	1		
	Tutoría programada	3	3		
	Laboratorio	36	4		

**PLANIFICACIÓN POR GRUPO DE TEORÍA**



RESUMEN DE LAS ACTIVIDADES

Actividad docente	Competencias asociadas	Actividad Profesor	Actividad alumno	Procedimiento de evaluación	P	NP	Total	C
Clases de teoría	CG1-MF1, CG2-MF1, CG3-MF1, CG5-MF1, CG6-MF1, CG7-MF1, CG8-MF1, CT1-MF1, CT2-MF1, CT3-MF1, CT5-MF1, CT7-MF1, CT11-MF1, CT12-MF1, CT12-MF2,	Exposición de conceptos teóricos y planteamiento de cuestiones y nuevos objetivos.	Toma de apuntes. Resolución de cuestiones. Desarrollo de los nuevos objetivos. Formulación de preguntas y dudas.	Calificación de las respuestas realizadas a preguntas relacionadas con los conceptos teóricos.	45	67,5	112,5	15%
Seminarios	CE11-MFQF2, CE11-MFQF3, CE12-MFQF1, CE12-MFQF2, CE13-MFQF3	Aplicación de la teoría a la resolución de ejercicios numéricos y problemas. Planteamiento de nuevas cuestiones.	Resolución de los ejercicios numéricos, problemas y cuestiones. Formulación de preguntas y dudas.	Calificación de las respuestas (planteamiento y resultado) realizadas para la resolución de ejercicios numéricos y problemas.	15	22,5	37,5	
Tutorías	CT2-MF1, CT3-MF1, CT5-MF1, CT3-MF1, CE11-MFQF2, CE11-MFQF3, CE12-MFQF1, CE12-MFQF2, CE13-MFQF3	Dirección y supervisión del estudio y actividades del alumno. Planteamiento de cuestiones. Resolución de dudas.	Consulta al profesor sobre las dificultades conceptuales y metodológicas que encuentra al estudiar la materia. Planteamiento de cuestiones y respuesta a las propuestas por el profesor.	No evaluable.				
Tutorías dirigidas	CT2-MF1, CT3-MF1, CT5-MF1, CT3-MF1, CE11-MFQF2, CE11-MFQF3, CE12-MFQF1, CE12-MFQF2, CE13-MFQF3	Propuesta y valoración crítica de trabajos. Exposición y planteamiento de nuevos objetivos	Cooperación con los compañeros en la elaboración de trabajos. Análisis crítico de los trabajos de otros grupos. Presentación oral del trabajo corregido. Formulación de preguntas y dudas.	Valoración del trabajo, de los análisis realizados y de la presentación.	8	12	20	





Actividad docente	Competencias asociadas	Actividad Profesor	Actividad alumno	Procedimiento de evaluación	P	NP	Total	C
<b>Laboratorio</b>	CG6-MF1, CG7-MF1, CG8-MF1, CG9-MF1, CG10-MF1, CG10-MF2, CG11-MF1, CG11-MF2, CG12-MF1, CG13-MF1, CT1-MF1, CT2-MF1, CT3-MF1, CT5-MF1, CT7-MF1, CE11-MFQF2, CE11-MFQF3, CE13-MFQF3	Aplicación de los contenidos teóricos a problemas prácticos. Desarrollo de habilidades experimentales y de cálculo numérico. Obtención y tratamiento de datos experimentales. Herramientas de modelización molecular.	Preparación, realización y estudio de los contenidos propuestos. Elaboración de informes de algunas de las prácticas realizadas.	Valoración del trabajo realizado y de los resultados obtenidos. Valoración de los informes de prácticas presentados. Valoración de las habilidades y conocimientos adquiridos.	51	49	100	20%
<b>Exámenes</b>	Las de clases de teoría, seminarios y tutorías.	Propuesta, vigilancia y corrección del examen. Calificación del alumno.	Preparación y realización.	Corrección y valoración de los exámenes.	12	18	30	65%

**P : Presenciales; NP: no presenciales (trabajo autónomo); C: calificación**