# Guía Docente

# QUÍMICA FÍSICA I

**FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS**
**UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID**
**CURSO 2022-2023**

## I.- IDENTIFICACIÓN

**NOMBRE DE LA ASIGNATURA:** Química Física I
**NÚMERO DE CRTÉDITOS:** 12
**CARÁCTER:** Obligatoria
**MATERIA:** Química Física
**MÓDULO:** Fundamental
**TITULACIÓN:** Grado en Química
**SEMESTRE/CUATRIMESTRE:** Anual (segundo curso)
**DEPARTAMENTO/S:** Química Física

**PROFESOR/ES RESPONSABLE/S:**

| | |
|---|---|
| **Coordinador de la asignatura** | **Profesor:** FRANCISCO JAVIER AOIZ MOLERES<br>**Departamento:** Química Física<br>**Despacho:** QA-279<br>**e-mail:** aoiz@ucm.es |
| **Coordinador del laboratorio** | **Profesor:** ANDRÉS GUERRERO MARTÍNEZ<br>**Departamento:** Química Física<br>**Despacho:** QA-249<br>**e-mail:** aguerrero@quim.ucm.es |

| **Teoría Grupo A** | |
|---|---|
| **1er cuatrimestre**<br>**Teoría**<br>**Seminario**<br>**Tutoría** | **Profesor:** JUAN ENRIQUE VERDASCO COSTALES<br>**Departamento:** Química Física<br>**Despacho:** QA-243<br>**e-mail:** verdasco@ucm.es |
| **2º cuatrimestre**<br>**Teoría**<br>**Seminario**<br>**Tutoría** | **Profesor:** FRANCISCO JAVIER SÁNCHEZ BENITEZ<br>Departamento: Química Física<br>**Despacho:** QB-221<br>**e-mail:** javiersbenitez@ucm.es |

| **Teoría Grupo B** | |
|---|---|
| **1er cuatrimestre**<br>**Teoría**<br>**Seminario**<br>**Tutoría** | **Profesor:** JUAN ENRIQUE VERDASCO COSTALES<br>**Departamento:** Química Física<br>**Despacho:** QA-243<br>**e-mail:** verdasco@ucm.es |
| **2º cuatrimestre**<br>**Teoría**<br>**Seminario**<br>**Tutoría** | **Profesor:** JOSÉ TORTAJADA PÉREZ<br>**Departamento:** Química Física<br>**Despacho:** QA-512<br>**e-mail:** jtp@quim.ucm.es |

| Teoría Grupo C | | |
|---|---|---|
| **1er cuatrimestre**<br>**Teoría**<br>**Seminario**<br>**Tutoría** | **Profesor:**<br>**Departamento:**<br>**Despacho:**<br>**e-mail:** | MARTA MENÉNDEZ<br>Química Física<br>QA-244<br>menendez@ucm.es |
| **2º cuatrimestre**<br>**Teoría**<br>**Seminario**<br>**Tutoría** | **Profesor:**<br>**Departamento:**<br>**Despacho:**<br>**e-mail:** | ELENA JUNQUERA<br>Química Física<br>QB-250<br>junquera@ucm.es |

| Teoría Grupo D | | |
|---|---|---|
| **1er cuatrimestre**<br>**Teoría**<br>**Seminario**<br>**Tutoría** | **Profesor:**<br>**Departamento:**<br>**Despacho:**<br>**e-mail:** | JUAN JOSÉ OMISTE<br>Química Física<br>QB-254<br>jomiste@ucm.es |
| **2º cuatrimestre**<br>**Teoría**<br>**Seminario**<br>**Tutoría** | **Profesor:**<br>Departamento:<br>**Despacho:**<br>**e-mail:** | NICCOLO CASELLI<br>Química Física<br>QB-219<br>ncaselli@ucm.es |

| Teoría Grupo E (inglés) | | |
|---|---|---|
| **1er cuatrimestre**<br>**Teoría**<br>**Seminario**<br>**Tutoría** | **Profesor:**<br>**Departamento:**<br>**Despacho:**<br>**e-mail:** | FRANCISCO JAVIER AOIZ MOLERES<br>Química Física<br>QA-279<br>aoiz@quim.ucm.es |
| **2º cuatrimestre**<br>**Teoría**<br>**Seminario**<br>**Tutoría** | **Profesor:**<br>**Departamento:**<br>**Despacho:**<br>**e-mail:** | PEDRO GÓMEZ CALZADA<br>Química Física<br>QA-506<br>pgomez@quim.ucm.es |
| | | |

| Teoría Grupo F | | |
|---|---|---|
| **1er cuatrimestre**<br>**Teoría**<br>**Seminario**<br>**Tutoría** | **Profesora:**<br>**Departamento:**<br>**Despacho:**<br>**e-mail:** | REYNIER SUARDIAZ del RÍO<br>Química Física<br>QA-280<br>reysuard@ucm.es |
| **2º cuatrimestre**<br>**Teoría**<br>**Seminario**<br>**Tutoría** | **Profesor:**<br>**Departamento:**<br>**Despacho:**<br>**e-mail:** | CRISTINA DÍEZ BLANCO<br>Química Física<br>QA-508<br>crdiaz08@ucm.es |

| Laboratorio QA238 | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|
| **Grupo** | **Cuatr.** | **Profesores** | **Correo** | **Despacho** | **Depar.** |
| **Sem TGS** | 1º y 2º | F. JAVIER AOIZ MOLERES | aoiz@quim.ucm.es | QA279 | QF |
| **Sem TGS** | 1º y 2º | LUIS BAÑARES MORCILLO | lbanares@ucm.es | QA281 | QF |
| **Sem TGS** | 1º y 2º | LUIS BAÑARES MORCILLO | lbanares@ucm.es | QA281 | QF |
| **Sem TGS** | 1º Y 2º | MARTA MENÉNDEZ | menendez@ucm.es | QA244 | QF |
| **Sem. TGS** | 1º Y 2º | ÁLVARO LOBATO FERNANDEZ | a.lobato@ucm.es | | QF |
| **A1** | 2º | VERDASCO COSTALES, J. Enrique | verdasco@ucm.es | QA-243 | QF |
| **A2** | 2º | MARTÍNEZ PEDRERO, Fernando | fernandm@ucm.es | | QF |
| **A3** | 2º | DÍAZ BLANCO, Cristina | crdiaz08@ucm.es | | QF |
| **A4** | 2º | MARGGI POULLAIN, Sonia | smarggi@ucm.es | | QF |
| **A5** | 2º | AHIJADO GUZMÁN, Rubén | ahijado@quim.ucm.es | | QF |
| **A6** | 2º | LABRADOR PÁEZ, Lucía | lulabrad@ucm.es | | QF |
| **A7** | 2º | CASELLI, Niccolo | ncaselli@ucm.es | QB219 | QF |
| **A8** | 2º | MUÑOZ ÚBEDA, Mónica | mmunozub@ucm.es | | QF |
| **B1** | 2º | VERDASCO COSTALES, J. Enrique | verdasco@ucm.es | QA-243 | QF |
| **B2** | 2º | MARTÍNEZ PEDRERO, Fernando | fernandm@ucm.es | | QF |
| **B3** | 2º | DÍAZ BLANCO, Cristina | crdiaz08@ucm.es | | QF |
| **B4** | 2º | MARGGI POULLAIN, Sonia | smarggi@ucm.es | | QF |
| **B5** | 2º | AHIJADO GUZMÁN, Rubén | ahijado@quim.ucm.es | | QF |
| **B6** | 2º | LABRADOR PÁEZ, Lucía | lulabrad@ucm.es | | QF |
| **B7** | 2º | CASELLI, Niccolo | ncaselli@ucm.es | QB219 | QF |
| **B8** | 2º | MUÑOZ ÚBEDA, Mónica | mmunozub@ucm.es | | QF |
| **C1** | 2º | AHIJADO GUZMÁN, Rubén | ahijado@quim.ucm.es | | QF |
| **C2** | 2º | LABRADOR PÁEZ, Lucía | lulabrad@ucm.es | | QF |
| **C3** | 2º | CASELLI, Niccolo | ncaselli@ucm.es | QB219 | QF |
| **C4** | 2º | MUÑOZ ÚBEDA, Mónica | mmunozub@ucm.es | | QF |
| **C5** | 2º | MONTERO CATALINA, Carlos | camont07@ucm.es | | QF |
| **C6** | 2º | THOMPSON, Sebastián | sthompso@ucm.es | | QF |
| **C7** | 2º | ABBASI PÉREZ, David | davidabb@ucm.es | | QF |
| **C8** | 2º | SUARDIAZ DEL RIO, Reynier | reysuard@ucm.es | QA-280 | QF |

| | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|
| **D1** | 2º | AHIJADO GUZMÁN, Rubén | ahijado@quim.ucm.es | | QF |
| **D2** | 2º | LABRADOR PÁEZ, Lucía | lulabrad@ucm.es | | QF |
| **D3** | 2º | MUÑOZ ÚBEDA, Mónica | mmunozub@ucm.es | | QF |
| **D4** | 2º | MONTERO CATALINA, Carlos | camont07@ucm.es | | QF |
| **D5** | 2º | THOMPSON, Sebastián | sthompso@ucm.es | | QF |
| **D6** | 2º | MATEOS GIL, Pablo | pamate04@ucm.es | | QF |
| **D7** | 2º | SUARDIAZ DEL RIO, Reynier | reysuard@ucm.es | QA-280 | QF |
| **D8** | 2º | OMISTE ROMERO, Juan José | jomiste@ucm.es | QB254 | QF |
| **E1** | 2º | AHIJADO GUZMÁN, Rubén | ahijado@quim.ucm.es | | QF |
| **E2** | 2º | LABRADOR PÁEZ, Lucía | lulabrad@ucm.es | | QF |
| **E3** | 2º | MONTERO CATALINA, Carlos | camont07@ucm.es | | QF |
| **E4** | 2º | THOMPSON, Sebastián | sthompso@ucm.es | | QF |
| **E5** | 2º | THOMPSON, Sebastián | sthompso@ucm.es | | QF |
| **E6** | 2º | SUARDIAZ DEL RIO, Reynier | reysuard@ucm.es | | QF |
| **E7** | 2º | OMISTE ROMERO, Juan José | jomiste@ucm.es | QB254 | QF |
| **E8** | 2º | FERNÁNDEZ CASTILLO, Jesús | jfernand@ucm.es | QA242 | QF |
| **F1** | 2º | AHIJADO GUZMÁN, Rubén | ahijado@quim.ucm.es | | QF |
| **F2** | 2º | LABRADOR PÁEZ, Lucía | lulabrad@ucm.es | | QF |
| **F3** | 2º | MONTERO CATALINA, Carlos | camont07@ucm.es | | QF |
| **F4** | 2º | ABBASI PÉREZ, David | davidabb@ucm.es | | QF |
| **F5** | 2º | MATEOS GIL, Pablo | pamate04@ucm.es | | QF |
| **F6** | 2º | FERNÁNDEZ CASTILLO, Jesús | jfernand@ucm.es | QA241 | QF |
| **F7** | 2º | RECIO IBAÑEZ, Pedro | pedrecio@ucm.es | | QF |
| **F8** | 2º | ARROYO BETANCOURT, Ane | anearroy@ucm.es | | QF |

## 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:

### ■ 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. Cuantización de la energía. Espectro fotoeléctrico. 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.

**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. Espectro del átomo de hidrógeno.

**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. Regla 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.

**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 y segundo 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 de simetría. Orbitales moleculares localizados. Orbitales híbridos. *Moléculas triatómicas no lineales: $H_2O$.* Orbitales moleculares de simetría. Diagramas de Walsh. Hibridación en moléculas poliatómicas. Aproximación π-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.

***Laboratorio 1:*** *Teoría de Grupos y simetría I*
***Laboratorio 2:*** *Teoría de grupos y simetría II*
***Laboratorio 3:*** *Teoría de grupos y simetría III*

**TEMA IV. Espectroscopia**

**Lección 14: Introducción a la Espectroscopía Molecular**

Espectro electromagnético: tipos de espectroscopias. Radiación del cuerpo negro: Ley de Planck. 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. Fundamentos de la radiación láser y tipos de láseres.

**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: Espectroscopía de Resonancia Magnética**

Momento angular de espín y momento magnético. Estados de espín. Interacción espín-campo magnético. Espectroscopia de RMN: desplazamiento químico y apantallamiento. Medida del desplazamiento químico: escala δ. Intensidad de las señales. Acoplamiento espín-espín: análisis de primer orden de la estructura fina. Fenómenos de relajación. Métodos experimentales. Aplicaciones de la espectroscopia de RMN. Espectroscopia de RSE.

**Lección 17: Espectroscopía de rotación**

Espectroscopia de microondas y de infrarrojo lejano: espectros de rotación pura. *Moléculas diatómicas*: modelos de rotor rígido y elástico. Niveles de energía. Reglas de selección. Transiciones espectrales. Distribución de la intensidad de las líneas

espectrales. *Moléculas poliatómicas*: clasificación por los momentos de inercia. Niveles de energía. Reglas de selección. Transiciones espectrales.
Sustitución isotópica. Efecto Stark. Métodos experimentales. Aplicaciones de la espectroscopia de rotación.

**Lección 18: Espectroscopía de vibración**

Zonas de la región infrarroja: IR-cercano, IR-medio e IR-lejano. *Vibración de moléculas diatómicas*: Oscilador armónico. Oscilador anarmónico: anarmonicidad de las vibraciones. Niveles de energía. Reglas de selección. Transiciones espectrales. Espectros de vibración rotación: Niveles de energía. Reglas de selección. Transiciones espectrales. Influencia de la vibración sobre la rotación. *Vibración de moléculas poliatómicas*: modos normales. Tratamiento mecano-cuántico de las vibraciones moleculares. 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: Espectroscopía 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: Espectroscopía 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. Vías de desactivación de estados electrónicos excitados: fluorescencia y fosforescencia. Fotodisociación y predisociación. Métodos experimentales. Espectroscopia fotoelectrónica. Aplicaciones de la espectroscopia electrónica.

***Laboratorio 4:*** *Modelización Molecular I*
***Laboratorio 5:*** *Modelización Molecular II*
***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:*** *Espectroscopía infrarroja I*
***Laboratorio 10:*** *Espectroscopía infrarroja II*
***Laboratorio 11:*** *Espectroscopía UV-VIS*
***Laboratorio 12:*** *Fotoquímica*
***Laboratorio 13:*** *Simulación y modelado de espectros de RMN*

## 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. – RESULTADOS DEL APRENDIZAJE

Una vez superada esta asignatura, en relación a las enseñanzas incluidas en el programa teórico y práctico, el alumno debe ser capaz de:

**TEMA I.**

**Lección 1.**

1. Conocer los orígenes de la teoría cuántica.
2. Aplicar las ecuaciones del efecto fotoeléctrico.
3. Explicar el carácter ondulatorio de la materia.
4. Aplicar la ecuación de De Broglie.

**Lección 2.**

1. Describir y explicar la ecuación de Schrödinger.
2. Utilizar el concepto de estados estacionarios.
3. Explicar el concepto de función de onda y la interpretación probabilística.

**Lección 3.**

1. Conocer y manejar el concepto de operador.
2. Utilizar ecuaciones de valores propios.
3. Utilizar el operador Hamiltoniano y calcular valores esperados.
4. Conocer las reglas de conmutación y la compatibilidad de observables.
5. Deducir la relación de incertidumbre.

**Lección 4.**

1. Aplicar y resolver la ecuación de Schrödinger a la partícula en una caja de una o más dimensiones.
2. Explicar la relación entre la cuantización de la energía y el confinamiento espacial.
3. Explicar el concepto de degeneración y su relación con la simetría.

**Lección 5.**

1. Utilizar el oscilador armónico como modelo de vibración de una molécula.
2. Aplicar y resolver la ecuación de Schrödinger a un oscilador armónico.
3. Calcular los niveles de energía y estudiar las propiedades de las funciones de onda del oscilador armónico.
4. Aplicar el teorema del virial.
5. Resolver problemas del oscilador armónico.

**Lección 6.**

1. Utilizar el rotor rígido como modelo de rotación de una molécula.
2. Resolver la ecuación de Schrödinger para un rotor rígido y conocer los conceptos básicos de la teoría cuántica del momento angular.
3. Utilizar los operadores del momento angular y sus propiedades de conmutación.
4. Describir los armónicos esféricos y sus representaciones.
5. Resolver problemas del rotor rígido.

**TEMA II.**

**Lección 7.**

1. Escribir la ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno.
2. Descomponer la ecuación en parte radial y angular y esquematizar la resolución de la ecuación de Schrödinger.
3. Describir los valores posibles de los números cuánticos.
4. Analizar la dependencia de la parte radial de la función de onda con la distancia.
5. Analizar la dependencia de la parte angular con los ángulos de Euler.
6. Calcular el número de máximos y mínimos de las funciones de onda radial y angular en función de los números cuánticos.
7. Escribir la energía de los orbitales en función del número cuántico principal $n$.
8. Relacionar el momento angular total y su proyección sobre el eje $z$ con los números cuánticos $l$ y $m$.
9. Describir e interpretar el experimento de Stern-Gerlach.
10. Justificar la existencia de un momento angular de espín.
11. Calcular el momento angular total del átomo de hidrogeno.
12. Interpretar el espectro del átomo de hidrogeno.

**Lección 8.**

1. Escribir la ecuación de Schrödinger para el átomo de helio.
2. Mostrar el efecto de la repulsión electrónica en la posible resolución de la ecuación de Schrödinger para el átomo de helio.
3. Escribir una solución aproximada para la ecuación.
4. Formular el principio variacional.
5. Explicar el fenómeno de apantallamiento y analizar la dependencia de la energía con la carga efectiva.
6. Escribir la expresión del método de Hartree-Fock.
7. Describir el método del Campo Autoconsistente.
8. Justificar la antisimetría de la función de onda electrónica por la indiscernibilidad de los electrones.

9. Mostrar que un determinante de Slater produce una función de onda electrónica antisimétrica.
10. Escribir el determinante de Slater para el átomo de helio.
11. Definir y aplicar el principio de exclusión de Pauli.
12. Relacionar la energía de los orbitales con su configuración electrónica.

**Lección 9.**

1. Definir el acoplamiento de momentos angulares orbitales y de espín dentro del esquema de acoplamiento LS.
2. Distinguir entre electrones equivalentes y no equivalentes.
3. Determinar los términos electrónicos resultantes de un acoplamiento de momentos angulares.
4. Ordenar los términos electrónicos en función de sus momentos angulares totales de espín y orbital mediante las reglas de Hund.
5. Obtener el momento angular total de átomo polielectrónico.
6. Aplicar las reglas de selección a los tránsitos en los espectros atómicos.

**TEMA III.**

**Lección 10.**

1. Aplicar el método variacional en la resolución de la ecuación de Schrödinger electrónica utilizando orbitales moleculares CLOA para la molécula $H_2^+$.
2. Ordenar energéticamente los OM-CLOA obtenidos para la molécula $H_2^+$.
3. Dibujar esquemáticamente la densidad de carga electrónica para orbitales enlazantes y antienlazantes.

**Lección 11.**

1. Definir el hamiltoniano de la molécula de $H_2$ y explicar el término de repulsión electrónica.
2. Presentar y explicar las aproximaciones utilizadas para resolver la ecuación de Schrödinger electrónica para la molécula de $H_2$.
3. Explicar las configuraciones electrónicas moleculares para las moléculas diatómicas homonucleares del primer y segundo periodos.
4. Definir, analizar y justificar el orden de enlace, la energía de disociación y las propiedades físicas de las moléculas diatómicas homonucleares del primer y segundo periodos.
5. Explicar los términos electrónicos moleculares de las moléculas diatómicas del primer y segundo periodos.
6. Definir y explicar la correlación electrónica y la integral de configuraciones.
7. Presentar y discutir las configuraciones electrónicas moleculares para las moléculas diatómicas heteronucleares sencillas de átomos similares y de átomos muy diferentes.
8. Definir y estimar el carácter iónico de un enlace.

**Lección 12.**

1. Contrastar la geometría molecular con la estructura electrónica de moléculas poliatómicas sencillas.
2. Presentar y explicar los orbitales moleculares localizados y deslocalizados.
3. Introducir el concepto de orbitales híbridos.
4. Aplicar los orbitales moleculares deslocalizados y localizados a moléculas poliatómicas de geometría lineal ($BeH_2$), trigonal plana ($BH_3$) y tetraédrica ($CH_4$).

5. Explicar y analizar la geometría de las moléculas triatómicas no lineales ($H_2O$). Presentar y discutir los diagramas de correlación de Walsh.
6. Presentar la aproximación π-electrónica en los hidrocarburos conjugados y aromáticos: eteno, butadieno y benceno.
7. Aplicar el método aproximado de Hückel para obtener las funciones de onda moleculares y algunas propiedades de moléculas sencillas con enlaces deslocalizados.

**Lección 13.**

1. Diferenciar los métodos mecano-clásicos y mecano-cuánticos para la predicción de estructuras moleculares.
2. Describir los términos de energía usados en los métodos de mecánica molecular.
3. Describir los términos del hamiltoniano electrónico molecular y razonar la necesidad de recurrir a métodos aproximados para resolver la ecuación de ondas electrónica molecular.
4. Justificar el uso de funciones determinantes (determinantes de Slater) como funciones de onda aproximadas y describir el proceso autoconsistente de resolución de la ecuación de Schrödinger electrónica para un sistema molecular.
5. Exponer las ventajas e inconvenientes de desarrollar las funciones monoelectrónicas (orbitales moleculares) en términos de un conjunto de funciones de base conocidas.
6. Especificar las funciones de base más comunes.
7. Describir la estrategia de los métodos semiempíricos: aproximaciones numéricas y parametrización.
8. Resumir el concepto de correlación electrónica y los esquemas de los métodos de correlación.
9. Realizar cálculos de energía electrónica molecular mediante programas estándar de modelización disponibles.
10. Analizar la información suministrada por el programa relativa a la energía molecular, geometría de equilibrio, energía y descripción de los orbitales moleculares, distribución de carga y modos normales de vibración.

**TEMA IV.**

**Lección 14.**

1. Describir el espectro electromagnético y localizar en el espectro las zonas correspondientes a las distintas técnicas de espectroscopía molecular.
2. Explicar la ley de Planck y radiación del cuerpo negro.
3. Explicar la interacción materia-radiación y realizar cálculos sencillos con los coeficientes de Einstein y magnitudes relacionadas.
4. Describir el funcionamiento básico de un láser y los requisitos necesarios para que un determinado sistema produzca radiación láser.
5. Explicar los distintos tipos de láseres, su funcionamiento y diferencias.
6. Definir el momento de transición y la relación con las intensidades de las transiciones espectroscópicas y las reglas de selección.
7. Realizar cálculos con la ley de Lambert-Beer para extraer información de las bandas espectrales.
8. Describir las distintas contribuciones al ensanchamiento de las líneas espectrales.
9. Explicar los fundamentos de la radiación láser y los principales tipos de láseres.

**Lección 15.**

1. Aplicar la aproximación de Born-Oppenheimer para separar el movimiento nuclear del electrónico.
2. Dibujar curvas de energía potencial y especificar la energía de disociación y la geometría molecular de mínima energía.
3. Describir superficies de energía potencial.
4. Separar los movimientos internos vibracional y rotacional.
5. Calcular la energía vibrorrotacional haciendo uso de los modelos del oscilador armónico y rotor rígido.

**Lección 16.**

1. Definir el momento angular de espín (núcleo y electrón) y el momento dipolar magnético. Determinar el número de estados nucleares a partir del espín nuclear.
2. Calcular y representar la energía de los estados de espín nuclear en presencia de un campo magnético dado. Calcular la frecuencia de resonancia de un núcleo no apantallado.
3. Justificar la influencia de la temperatura y del campo magnético aplicado en la intensidad de las señales de RMN.
4. Explicar el fenómeno de apantallamiento. Definir el desplazamiento químico y las escalas para medirlo. Realizar cálculos sencillos de desplazamiento químico.
5. Explicar el acoplamiento espín-espín. Predecir el aspecto de espectros de moléculas orgánicas sencillas mediante la aproximación de primer orden.
6. Describir de modo general las técnicas experimentales de RMN.
7. Indicar algunas de las aplicaciones más importantes de la RMN.
8. Describir la espectroscopia de espín electrónico y sus principales aplicaciones.

**Lección 17.**

1. Describir el espectro de rotación pura: espectroscopías de Microondas e Infrarrojo-Lejano y definir los intervalos espectrales correspondientes.
2. Explicar los estados o niveles de energía, las reglas de selección y las transiciones espectrales que proporcionan los espectros de rotación en moléculas diatómicas según los modelos de rotor rígido y rotor elástico.
3. Calcular la distribución de la intensidad de las líneas en espectros de rotación pura de moléculas diatómicas, de acuerdo con la ley de distribución de Boltzmann.
4. Establecer la clasificación de las moléculas poliatómicas mediante los momentos de inercia en tipos diferentes de rotores.
5. Explicar el efecto de la sustitución isotópica en las moléculas (isotopómeros) para determinar constantes moleculares.
6. Describir el efecto Stark de primer orden en los espectros de rotación pura.
7. Indicar algunas de las aplicaciones más importantes de la espectroscopia de microondas.

**Lección 18.**

1. Distinguir las zonas de la región infrarroja: IR-cercano, IR-medio e IR-lejano.
2. Aplicar el modelo del oscilador armónico para estudiar la vibración de moléculas diatómicas.
3. Describir el modelo del oscilador anarmónico. Calcular los niveles de energía y aplicar las reglas de selección.
4. Predecir espectros de vibración-rotación de moléculas diatómicas.
5. Explicar la influencia de la vibración sobre la rotación.
6. Describir los modos normales de vibración.
7. Explicar las bandas fundamentales, sobretonos y bandas de combinación.

8. Distinguir las vibraciones paralelas y perpendiculares y predecir los perfiles de las bandas de vibración-rotación.
9. Explicar la influencia del espín nuclear en la intensidad relativa de las líneas de rotación.
10. Describir los métodos experimentales y las aplicaciones de la espectroscopia infrarroja.

**Lección 19.**

1. Describir el mecanismo de interacción materia-radiación por efecto de dipolo inducido y el concepto de polarizabilidad molecular.
2. Desarrollar las teorías clásica y cuántica que justifican el efecto Raman.
3. Describir los espectros Raman de rotación pura y de vibración-rotación de moléculas diatómicas y poliatómicas y las reglas de selección para las diferentes transiciones espectrales.
4. Realizar cálculos sobre la posición de las diferentes bandas de vibración y líneas de rotación de los espectros Raman de moléculas sencillas.
5. Relacionar la actividad Raman e IR de las diferentes vibraciones en las moléculas poliatómicas.
6. Utilizar el grado de polarización de las vibraciones, relacionarlo con su simetría, y determinar la simetría molecular.

**Lección 20.**

1. Describir los estados electrónicos moleculares y las transiciones electrónicas puras.
2. Utilizar la notación de estados electrónicos en moléculas diatómicas y las reglas de selección.
3. Explicar la estructura vibracional de una banda electrónica haciendo uso del principio de Frank-Condon.
4. Describir los tipos de transiciones electrónicas en moléculas poliatómicas.
5. Explicar los fenómenos de desactivación de estados electrónicos excitados: fluorescencia y fosforescencia.
6. Estudiar los procesos de fotodisociación y predisociación.
7. Describir los métodos experimentales y las aplicaciones de la espectroscopia electrónica.

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

| Actividad | Presencial (horas) | Trabajo autónomo (horas) | Créditos |
|---|---|---|---|
| **Clases teóricas** | 56 | 56,5 | 4,5 |
| **Seminarios** | 20 | 17,5 | 1,5 |
| **Tutorías / Trabajos dirigidos** | 8 | 12 | 0,8 |
| **Prácticas de laboratorio** | 42 | 58 | 4,0 |
| **Preparación de trabajos y exámenes** | 6 | 24 | 1,2 |
| **Total** | **132** | **168** | **12** |

## VIII.- 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 cuya misión fundamental será la realización de ejercicios y la resolución de cuestiones teórico-prácticas. Los ejercicios que se les planteen a los alumnos se les entregarán con anterioridad para que sean resueltos por ellos y se recogerán en las tutorías. Los alumnos participarán activamente en la resolución pública y corrección de los mismos. Todo ello permitirá que el alumno ponga en práctica sus habilidades en la obtención de información, desarrollando habilidades relacionadas con el manejo de información bibliográfica y de trabajo en equipo (CT2-MF1, CT3-MF1 y CT5-MF1).

El profesor podrá programar **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.

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 investigadora, 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 de algunas de las prácticas realizadas (CT1-MF1, CT2-MF2, CT3-MF3, CT5-MF1, CT7-MF1).

## IX.- BIBLIOGRAFÍA

### BÁSICA:


- Engel, T., Reid, P.: *Physical Chemistry*. Pearson 3rd ed. (2013). (Existe traducción al español de la 1ª Edición: *Química Física*, Pearson Addison Wesley, Madrid, 2006.)
- Atkins, P. W.; De Paula, J.; Keeler, J.: *Atkins Physical Chemistry*. Oxford University Press 2017 (11th Ed). (Existe traducción al español: *Química Física*, 8ª Edición, Editorial Médica Panamericana, Buenos Aires, 2008.)
- Levine, I.N.: *Physical Chemistry* 6 Ed. Mc Graw Hill, India (2011). (Existe traducción al español: *Fisicoquímica*, 5ª ed., McGraw-Hill/Interamericana de España, Madrid, 2004).


### COMPLEMENTARIA:


- Jim Baggott, *The Quantum Cookbook*. Oxford 2020.
- Bertrán Rusca, J.; Núñez Delgado, J. (coord.): *Química Física*, Volumen I, Ariel Ciencia, 2002.
- Levine, I. N.: *Quantum Chemistry*, 7th Edition. Prentice Hall, 2013. (La quinta edición está traducida como *Química Cuántica*. Prentice Hall. 2001).
- Berry, R. S.; Rice, S. A.; Ross, J.: *Physical Chemistry,* 2nd 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.
- Mc Halle, J.: *Molecular Spectroscopy* CRC Taylor and Francis, 2017.

- Levine, I. N.: *Molecular Spectroscopy*, Wiley 1975. (Existe traducción al español: *Espectroscopia Molecular*, AC. 1980).
- Maurya, R.C., Mir, J. C.; *Molecular Symmetry and Group Theory: Approaches in Spectroscopy and Chemical Reactions*. De Gruyter Textbook 2019.


## X.- EVALUACIÓN

El rendimiento académico del alumno y la calificación final de la asignatura se computarán de forma ponderada atendiendo a los porcentajes que se recogen a continuación y que se mantendrán en todas las convocatorias. Con carácter general, para superar la asignatura será necesario alcanzar una nota mínima de 5 sobre 10 en el cómputo total de todas las actividades evaluadas.

Las calificaciones de las actividades previstas para la evaluación de la asignatura se comunicarán a los estudiantes tan pronto como estén disponibles.

### ■ EXÁMENES ESCRITOS: 65%

Convocatoria ordinaria: se realizarán dos exámenes parciales y un examen final, comunes a todos los grupos.

Para superar esta convocatoria por parciales será necesario:

a) Obtener una nota mínima de 10 sobre 20 en la suma de los dos exámenes parciales.
b) Que en ninguno de los dos parciales la nota obtenida sea inferior a 4 sobre 10.
c) Que la calificación total ponderada con el resto de actividades sea al menos de 5 sobre 10.

Los alumnos que superen está convocatoria por parciales, es decir cumplan las condiciones anteriores, no estarán obligados a presentarse al examen final. El resto de los alumnos podrá examinarse de la materia del parcial no superado (parcial-final) o de la totalidad de la asignatura en el examen final de la convocatoria ordinaria. Para poder optar por la modalidad de examen parcial-final en la convocatoria ordinaria es necesario que el alumno haya obtenido una nota mínima de 5 en el parcial del que no se examina y una nota superior a 2 sobre 10 en el parcial del que se examina.

Todos los exámenes, parciales, finales y parcial-final de la convocatoria ordinaria constarán de preguntas y problemas sobre los contenidos de la asignatura, tanto de las clases teóricas y seminarios como de las tutorías dirigidas y laboratorios. En el examen de la convocatoria ordinaria, los alumnos que se presenten únicamente a un parcial, por tener el otro aprobado, realizarán un examen equivalente, en número de preguntas y duración, a los que se presenten al examen final.

En la convocatoria extraordinaria se realizará un único examen final semejante al realizado en la convocatoria ordinaria. Quienes no aprueben la asignatura en la convocatoria ordinaria deberán examinarse de todo el temario.

En cualquier caso, la nota mínima del examen final necesaria para superar la asignatura, tanto en la convocatoria ordinaria como en la extraordinaria, es de 4 sobre 10. Tanto en la convocatoria ordinaria como en la extraordinaria, cuando se realice un examen que cubra la totalidad del contenido de la asignatura, se exigirá un mínimo de 1,5 sobre 5 en

la parte del examen (primer o segundo cuatrimestres) en la que se haya obtenido la menor puntuación.

Las notas de los exámenes parciales se publicarán en un plazo máximo de 20 días a partir de la fecha de los mismos. En todo caso, se respetará el plazo mínimo de siete días entre la publicación de las calificaciones y la fecha del examen final de la asignatura.

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 la convocatoria ordinaria por este concepto se mantendrá en la convocatoria extraordinaria.

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 actitud general de los alumnos en el laboratorio, su trabajo durante las sesiones de prácticas, 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.

Durante el desarrollo del laboratorio, los profesores encargarán ejercicios o elaboración de datos que serán entregados en el plazo que se establezcan y contarán para la evaluación de la sesión práctica.

Cada alumno entregará **obligatoriamente** al final del laboratorio, en los plazos que se indiquen, una memoria que contenga el tratamiento de los datos de las prácticas realizadas en el laboratorio establecido por los coordinadores. La evaluación de la actividad presencial e informes constituirá un 70% de la calificación del laboratorio. El 30% restante de la calificación corresponderá a un examen específico una vez acabado el laboratorio, requiriéndose que **la calificación en este examen sea igual o superior a 4**. La nota mínima global del laboratorio necesaria para compensar con el resto de las evaluaciones (exámenes, trabajo personal) será de 4 sobre 10.

Los alumnos que no hayan alcanzado la nota de 4/10 en el examen de laboratorio de la convocatoria ordinaria, podrán presentarse a dicho examen en la convocatoria extraordinaria, siempre que hayan superado las actividades presenciales con una nota mayor o igual a 4. A los alumnos que hayan alcanzado la calificación global del laboratorio en la convocatoria ordinaria igual o superior a 4/10, se les mantendrá en la convocatoria extraordinaria.

En aquellos casos en que un estudiante suspenda la asignatura, pero haya aprobado el laboratorio **con una nota mayor o igual que 5**, se le mantendrá la calificación de la actividad presencial e informes durante un máximo de dos cursos académicos consecutivos con la condición de que asista **con carácter obligatorio** a las sesiones de Teoría de Grupos y Simetría, de cuyo aprovechamiento será evaluado cada año. La nota obtenida en la evaluación de estas sesiones en cada curso académico será prorrateada con la obtenida y guardada del resto de las prácticas. Además, **deberá realizar el examen de los contenidos del laboratorio** en la convocatoria ordinaria o en la extraordinaria 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.** Salvo en circunstancias excepcionales, se requerirá la asistencia a un 70% de las actividades presenciales para poder ser calificado en los exámenes parciales. **La actitud del alumno y su participación activa** en todas las actividades docentes se valorará positivamente en la calificación final.

## PLANIFICACIÓN DE ACTIVIDADES – CRONOGRAMA

| TEMA | ACTIVIDAD | HORAS | GRUPOS | INICIO | FIN |
|---|---|---|---|---|---|
| I. Fundamentos | Clases Teoría | 8 | 1 | 1ª Semana | 4ª Semana |
| | Clases Problemas | 2 | 1 | | |
| | Tutoría programada | 1 | 1 | | |
| II. Estructura Atómica | Clases Teoría | 8 | 1 | 4ª Semana | 8ª Semana |
| | Clases Problemas | 2 | 1 | | |
| | Tutoría programada | 1 | 1 | | |
| III. Estructura Molecular y Enlace Químico | Clases Teoría | 12 | 1 | 8ª Semana | 14ª Semana |
| | Clases Problemas | 6 | 1 | | |
| | Tutoría programada | 2 | 1 | | |
| | Laboratorio | 15 | 4 | | |
| IV. Espectroscopia | Clases Teoría | 28 | 1 | 15ª Semana | 28ª Semana |
| | Clases Problemas | 10 | 1 | | |
| | Tutoría programada | 4 | 1 | | |
| | Laboratorio | 27 | 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, CE11-MFQF2, CE11-MFQF3, CE12-MFQF1, CE12-MFQF2, CE13-MFQF3 | 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. | 56 | 56,5 | 112,5 | 15% |
| **Seminarios** | | 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. | 20 | 17.5 | 37,5 | |
| **Tutorías** | | 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 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| **Laboratorio** | 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. | 42 | 58 | 100 | 20% |
| **Exámenes** | 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. | 6 | 24 | 30 | 65% |
| **P : Presenciales; NP: no presenciales (trabajo autónomo); C: calificación** | | | | | | | | |