



GUÍA DOCENTE 2016-2017
Química Física I: Química Cuántica

1. Denominación de la asignatura:

Química Física I: Química Cuántica

Titulación

Grado en Química

Código

5274

2. Materia o módulo a la que pertenece la asignatura:

Química Física

3. Departamento(s) responsable(s) de la asignatura:

Química

4.a Profesor que imparte la docencia (Si fuese impartida por mas de uno/a incluir todos/as) :

María José Tapia Estévez

5. Curso y semestre en el que se imparte la asignatura:

2º Curso, 1er semestre

6. Tipo de la asignatura: (Básica, obligatoria u optativa)

Obligatoria

7. Requisitos de formación previos para cursar la asignatura:

Haber cursado Química General, Física y Matemáticas



8. Número de créditos ECTS de la asignatura:

3

9. Competencias que debe adquirir el alumno/a al cursar la asignatura

T1: demostrar capacidad de análisis y de síntesis
T6: Gestionar adecuadamente la información
T8: Expresarse correctamente.
T9: Aprender de forma autónoma
T17: Desarrollar razonamiento crítico
T20: Adquirir o poseer las habilidades básicas en TIC (Tecnologías de la Información y Comunicación).
T21: Que los estudiantes puedan transmitir información, ideas, problemas y soluciones a un público tanto especializado como no especializado.
G1: Demostrar conocimiento y comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionadas con las áreas de la química.
G2: Resolver problemas cuantitativos y cualitativos según modelos previamente desarrollados.
G3: Reconocer y analizar nuevos problemas dentro y fuera del ámbito de la química y plantear estrategias para solucionarlos.
G4: Adquirir habilidad para evaluar, interpretar y sintetizar información química
G16: Relacionar la química con otras disciplinas.
G17: Realizar cálculos y análisis de error con utilización correcta de magnitudes y unidades.
G18: Ser capaz de realizar y presentar informes científicos tanto de forma oral como escrita ante una audiencia.
E1: Adquirir los fundamentos de la terminología química, nomenclatura, convenios y unidades.
E2: Relacionar las propiedades macroscópicas con las de los átomos y moléculas individuales.
E12: Aplicar los principios de la mecánica cuántica en la descripción de la estructura y propiedades de átomos y moléculas.
E13: Adquirir las bases para aplicar y evaluar la interacción radiación-materia, los principios de la espectroscopia y las principales técnicas de investigación estructural.



10. Programa de la asignatura

10.1- Objetivos docentes
Aplicación de los fundamentos de la Mecánica Cuántica a la explicación de la estructura de átomos polielectrónicos y moléculas
10.2- Unidades docentes (Bloques de contenidos)
Tema 1 Tema 1 Concepto de Química Física. Repaso de conocimientos previos: preliminares de física y matemáticas. Postulados de la Mecánica Cuántica. Resultados de la resolución de la ecuación de Schrödinger para sistemas sencillos y átomos hidrogenoides. Interpretación de la función de onda. Momentos angulares de átomos hidrogenoides. Tema 2 Tema 2 Resolución de la ecuación de Schrödinger para sistemas polielectrónicos. Métodos aproximados de la Mecánica Cuántica: método de variaciones y método de perturbaciones independiente del tiempo. Función antisimétrica: determinante de Slater. Orbitales aproximados de Slater. Momentos angulares de los átomos polielectrónicos: acoplamiento. Símbolos de los estados electrónicos de los átomos. Espectros atómicos de emisión. Reglas de selección. Tema 3 Tema 3 Estudio mecanocuántico de las moléculas. Aproximación de Born- Oppenheimer. Moléculas diatómicas. Método de orbitales moleculares (OM). Acoplamiento de momentos angulares. Símbolos de los estados electrónicos de moléculas diatómicas. Reglas de selección. Método de enlace de valencia (EV). Polaridad del enlace. Comparación de las teorías de orbitales moleculares y enlace de valencia.



Tema 4

Tema 4

Moléculas poliatómicas. Geometría molecular. Valencia dirigida.

Hibridación.

Moléculas con enlaces múltiples. Conjugación y aromaticidad.

Aproximaciones de Hückel (OM).

10.3- Bibliografía

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

Atkins, P. W, Julio de Paula, (2010) Physical Chemistry, Novena, Freeman & Company, W. H.,

Atkins, P. W., (1994) Quanta : a handbook of concepts, Segunda, Oxford University Press,

Díaz, M. Y Roig, A., , (1975) 1. Química Física (vols. 1 y 2); , Alhambra,

Joan Bertrán Rusca; Javier Núñez Delgado (coords), (2002) Química Física I, Ariel Ciencia,

Levine, I. N, (2013) Volumen 2. Fisicoquímica, Quinta Edición, Mac Graw-Hill,

Levine, I. N., , (2001) Química Cuántica, Quinta, AC,

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

Clark T., Koch R., (2000) Libro electrónico de orbitales para el químico, Springer-Verlag Ibérica, Barcelona, 84-07-00509-5,

Atkins, P. W. and Friedman, R. S, (1996) 5. Molecular Quantum Mechanics, Oxford Univ. Press,

Baley Chapman, Lorna Elizabeth, (2013) Química cuántica: la química cuántica en 100 problemas , UNED, Madrid,

Hendrik F. Hamerka , (2004) Quantum Mechanics. A conceptual Approach., John Wiley & Sons, Inc. Publication, New Jersey, 0-471-64965-1,

Keith J. Laidler, John H. Meiser, Bryan C. Sanctuary, (2003) 6. Physical chemistry, Benjamin Cummings,

Robert J. Silbey, Robert A. Alberty, Mounji G. Bawendi, (2005) 7. Physical chemistry, John Wiley & Sons ,



11. Metodología de enseñanza y aprendizaje y su relación con las competencias que debe adquirir el estudiante:

Metodología	Competencia relacionada	Horas presenciales	Horas de trabajo	Total de horas
Clases teóricas	Las indicadas en punto 12	14	28	42
Seminarios	Las indicadas en punto 12	13	13	26
Evaluación	Las indicadas en punto 12	3	4	7
Total		30	45	75

12. Sistemas de evaluación:

Sistema de evaluación continua. La nota mínima en cada procedimiento para poder hacer la media será de 3 sobre 10. Para aprobar la asignatura, la nota media ponderada de los procedimientos debe ser igual o superior a 5 sobre 10.

Los alumnos que, habiendo superado la asignatura en la primera convocatoria, deseen mejorar su calificación deberán realizar las pruebas correspondientes a la segunda convocatoria.

Los estudiantes que fueran sorprendidos copiando o plagiando en cualquiera de los procedimientos de evaluación de la asignatura tendrán una calificación de cero en la nota global de la asignatura, de acuerdo con el artículo 17.2 del Reglamento de Evaluación de la Universidad de Burgos para el curso 2013-14

Procedimiento	Peso primera convocatoria	Peso segunda convocatoria
Entregas periódicas	5 %	0 %
Participación en las clases teóricas y seminarios	5 %	0 %
Pruebas parciales para la calificación de los conocimientos adquiridos a lo largo del curso	10 %	0 %
Prueba final escrita de teoría	40 %	40 %
Prueba final escrita de resolución de problemas	40 %	40 %
Realización de un test	0 %	20 %
Total	100 %	100 %



Evaluación excepcional:

Acorde a lo establecido en el Reglamento de Evaluación de la Universidad de Burgos, modificado en Consejo de Gobierno de 13.02.2013, en sus artículos 9.1, 9.2 y 9.3, los estudiantes que no puedan seguir los procedimientos habituales de evaluación continua deberán solicitar por escrito al Decano o Director de Centro acogerse a una «evaluación excepcional». Dicho escrito con las razones que justifiquen la imposibilidad de seguir la evaluación continua deberá presentarse antes del inicio del semestre lectivo o durante las dos primeras semanas de impartición de la asignatura. El Decano o Director resolverá la procedencia o no de admitir dicha excepcionalidad. Por circunstancias sobrevenidas dicha resolución podrá emitirse fuera de los plazos indicados.

No es requisito para someterse a la evaluación excepcional la asistencia a las actividades presenciales de la asignatura.

El procedimiento para la evaluación excepcional serán los correspondientes a los de la segunda convocatoria

- Prueba final escrita de teoría (peso 40 %).
- Prueba final escrita de resolución de problemas (peso 40 %).
- Realización de un test (peso 20 %).

13. Idioma en que se imparte:

Español