



GUÍA DOCENTE 2012-2013
Química Física I: Química Cuántica

1. Denominación de la asignatura:

Química Física I: Química Cuántica

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 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. Método del campo auto consistente de Hartree-Fock. Orbitales aproximados de Slater. Interacción de configuraciones. Momentos angulares de los átomos polielectrónicos: acoplamientos. Espectros atómicos de emisión. Efectos Zeeman y Paschen-Back. Tema 2 Tema 2 Estudio mecanocuántico de las moléculas. Aproximación de Born- Oppenheimer. Moléculas diatómicas. Método de orbitales moleculares (OM). Método de enlace de valencia (EV). Polaridad del enlace. Tema 3 Tema 3 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, (2006) Physical Chemistry, Octava, Oxford Univ. Press,
Atkins, P. W., (1994) Quanta, 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, (1996) 2. Fisicoquímica, Mac Graw-Hill,
Levine, I. N., , (2001) 4. Química Cuántica, 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,
Keith J. Laidler, John H. Meiser, Bryan C. Sanctuary, (2003) 6. Physical chemistry, Benjamin Cummings,
Robert J. Silbey, Robert A. Alberty, Mounsi 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	17	34	51
Seminarios, Debates	Las indicadas en punto 12	8	8	16
Evaluación	Las indicadas en punto 12	2	6	8
Total		27	48	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. Las actividades no recuperables en la segunda convocatoria son: (1) Entregas periódicas; (2) Participación en las clases teóricas y seminarios; (3) Resolución de cuestiones y problemas a lo largo del curso.

Procedimiento	Peso en la calificación final
Entregas periódicas	5 %
Participación en las clases teóricas y seminarios	5 %
Resolución de cuestiones y problemas a lo largo del curso	30 %
Prueba final escrita: desarrollo de un tema, respuesta de cuestiones y realización de un test	30 %
Prueba final escrita de resolución de problemas	30 %
Total	100 %