



GUÍA DOCENTE CURSO: 2012-13

DATOS BÁSICOS DE LA ASIGNATURA			
Asignatura:	Química Física II		
Código de asignatura:	50903215	Plan:	Grado en Química (Plan 2009)
Año académico:	2012-13	Ciclo formativo:	Grado
Curso de la Titulación:	-	Tipo:	Obligatoria
Duración:	Primer Cuatrimestre		
DISTRIBUCIÓN HORARIA DE LA ASIGNATURA SEGÚN NORMATIVA			
	Créditos:	6	Horas Presenciales del estudiante: 45
			Horas No Presenciales del estudiante: 105
			Total Horas: 150
UTILIZACIÓN DE LA PLATAFORMA VIRTUAL:		Apoyo a la docencia	

DATOS DEL PROFESORADO			
Nombre	Jara Pérez, Vicente		
Departamento	Química-Física, Bioquímica y Química Inorgánica		
Edificio	Edificio Científico Técnico de Químicas (CITE I) 2		
Despacho	160		
Teléfono	+34 950 015316	E-mail (institucional)	vjara@ual.es
Recursos Web personales	Web de Jara Pérez, Vicente		

Puede verificar la autenticidad, validez e integridad de este documento en la dirección:
<https://verificarfirma.ual.es/verificarfirma/code/gytoDBP7oiV3bfZT4XfAiw==>

Firmado Por	Universidad De Almeria	Fecha	23/07/2015
ID. FIRMA	blade39adm.ual.es	PÁGINA	1/8



gytoDBP7oiV3bfZT4XfAiw==

ORGANIZACIÓN DE LAS ACTIVIDADES

Actividades previstas para el aprendizaje y distribución horaria del trabajo del estudiante por actividad (estimación en horas)

I. ACTIVIDADES DEL ESTUDIANTE (Presenciales / Online)	• Gran Grupo	0,0	
	• Grupo Docente	26,0	
	• Grupo de Trabajo/Grupo Reducido	19,0	
	<i>Total Horas Presenciales/On line ...</i>		45,0
II. ACTIVIDADES NO PRESENCIALES DEL ESTUDIANTE (Trabajo Autónomo)	• (Trabajo en grupo, Trabajo individual)	105	
	<i>Total Horas No Presenciales ...</i>		105
TOTAL HORAS DE TRABAJO DEL ESTUDIANTE			150,0

Puede verificar la autenticidad, validez e integridad de este documento en la dirección:
<https://verificarfirma.ual.es/verificarfirma/code/gytoDBP7oiV3bfZT4XfAiw==>

Firmado Por

Universidad De Almeria

Fecha

23/07/2015

ID. FIRMA

blade39adm.ual.es

gytoDBP7oiV3bfZT4XfAiw==

PÁGINA

2/8



gytoDBP7oiV3bfZT4XfAiw==

ELEMENTOS DE INTERÉS PARA EL APRENDIZAJE DE LA ASIGNATURA

Justificación de los contenidos

Esta asignatura tiene contenidos de tres partes de la Química Física que están relacionadas entre sí, Química Cuántica, Espectroscopia y Termodinámica estadística. El estudio de la materia desde un punto de vista microscópico es el objetivo de los temas de esta asignatura. La primera parte es una introducción a la mecánica cuántica aplicada al estudio del enlace químico, que aporta los conocimientos teóricos necesarios para abordar la interacción radiación electromagnética-materia en la segunda parte de la asignatura, dedicada a la espectroscopia. La última parte de la asignatura es una introducción a la Termodinámica Estadística, que permite relacionar las propiedades microscópicas de la materia con sus propiedades a escala macroscópica.

Materia con la que se relaciona en el Plan de Estudios

Se relaciona con la materia de Química Física tal como se recoge en la memoria de Grado

Conocimientos necesarios para abordar la Asignatura

Es necesario que el alumno tenga un conocimiento elemental del enlace químico, como el que se recibe en la asignatura de Química de primer curso de grado y conocimientos de cálculo elemental y de física general que están contenidos en las asignatura de Física y Matemáticas de primer curso.

Requisitos previos recogidos en la memoria de la Titulación

No hay requisitos previos

COMPETENCIAS

Competencias Generales

Competencias Genéricas de la Universidad de Almería

- Capacidad para resolver problemas

Otras Competencias Genéricas

- Comprender y poseer conocimientos

Competencias Específicas desarrolladas

- Las técnicas principales de investigación estructural, incluyendo espectroscopia.
- Principios de mecánica cuántica y su aplicación en la descripción de la estructura y propiedades de átomos y moléculas.
- Relación entre propiedades macroscópicas y propiedades de átomos y moléculas individuales: incluyendo macromoléculas (naturales y sintéticas), polímeros, coloides y otros materiales.

OBJETIVOS/RESULTADOS DEL APRENDIZAJE

En el mismo orden de las competencias incluidas en el apartado anterior:

1. Aplicación de los contenidos teóricos de la asignatura en la solución el problema planteado. Encontrar la solución adecuada al problema planteado en el menor tiempo posible. Informe donde se aplique el método científico al describir, analizar, iagnosticar, organizar, demostrar y validar las diversas situaciones específicas del campo de conocimiento correspondiente a Química.
2. Poseer los conocimientos mínimos necesarios para el trabajo profesional.
3. Correlacionar los grupos funcionales con sus propiedades espectroscópicas
4. Conocer los postulados de la mecánica cuántica, comprender su aplicación a sistemas sencillos. Aplicar los métodos aproximados de la mecánica cuántica: método de variaciones y teoría de perturbaciones. Conocer y aplicar los principios de mecánica cuántica para la descripción y justificación de la estructura y propiedades de compuestos químicos, incluidos los de coordinación y organometálicos.
5. Conocer los principios de la mecánica estadística y la relación entre las constantes de equilibrio y las funciones de partición.

Puede verificar la autenticidad, validez e integridad de este documento en la dirección:
<https://verificarfirma.ual.es/verificarfirma/code/gytoDBP7oiV3bfZT4XfAiw==>

Firmado Por

Universidad De Almería

Fecha

23/07/2015

ID. FIRMA

blade39adm.ual.es

gytoDBP7oiV3bfZT4XfAiw==

PÁGINA

3/8



gytoDBP7oiV3bfZT4XfAiw==



Puede verificar la autenticidad, validez e integridad de este documento en la dirección:
<https://verificarfirma.ual.es/verificarfirma/code/gytoDBP7oiV3bfZT4XfAiw==>

Firmado Por	Universidad De Almeria	Fecha	23/07/2015
ID. FIRMA	blade39adm.ual.es	PÁGINA	4/8
			
gytoDBP7oiV3bfZT4XfAiw==			

BLOQUES TEMÁTICOS Y MODALIDADES ORGANIZATIVAS			
Bloque	Introducción a la Química Cuántica		
Contenido/Tema			
	Tema 1. Principios de la mecánica cuántica. Antecedentes de la mecánica cuántica. La Ecuación de Schrodinger y la interpretación de Born de la función de onda. Postulados de la mecánica cuántica.		
Modalidades Organizativas y Metodología de Trabajo			
<i>Modalidad Organizativa</i>	<i>Procedimientos y Actividades Formativas</i>	<i>Observaciones</i>	<i>Horas Pres./On line</i>
Grupo Docente	Clases magistrales/participativas		3,0
Grupo de Trabajo/Grupo Reducido	Resolución de problemas		2,0
Descripción del trabajo autónomo del alumno			
Contenido/Tema			
	Tema 2 . Aplicación de los postulados a sistemas sencillos. La partícula en una caja unidimensional, bidimensional y tridimensional. El oscilador armónico unidimensional. El rotor rígido.		
Modalidades Organizativas y Metodología de Trabajo			
<i>Modalidad Organizativa</i>	<i>Procedimientos y Actividades Formativas</i>	<i>Observaciones</i>	<i>Horas Pres./On line</i>
Grupo Docente	Clases magistrales/participativas		3,0
Grupo de Trabajo/Grupo Reducido	Resolución de problemas		2,0
Descripción del trabajo autónomo del alumno			
Contenido/Tema			
	Tema 3. Estructura atómica y espectros atómicos Estructura y espectros de los átomos hidrogenoides. Estructura de los átomos polielectrónicos. Espectros de los átomos polielectrónicos.		
Modalidades Organizativas y Metodología de Trabajo			
<i>Modalidad Organizativa</i>	<i>Procedimientos y Actividades Formativas</i>	<i>Observaciones</i>	<i>Horas Pres./On line</i>
Grupo Docente	Clases magistrales/participativas		3,0
Grupo de Trabajo/Grupo Reducido	Resolución de problemas		2,0
	Seminarios y actividades académicamente dirigidas		1,0
Descripción del trabajo autónomo del alumno			
Contenido/Tema			
	Tema 4. Estructura molecular. La aproximación de Born-Oppenheimer. Teoría del enlace de valencia. Teoría de orbitales moleculares. Orbitales moleculares de moléculas poliatómicas.		
Modalidades Organizativas y Metodología de Trabajo			
<i>Modalidad Organizativa</i>	<i>Procedimientos y Actividades Formativas</i>	<i>Observaciones</i>	<i>Horas Pres./On line</i>
Grupo Docente	Clases magistrales/participativas		3,0
Grupo de Trabajo/Grupo Reducido	Resolución de problemas		2,0
	Seminarios y actividades académicamente dirigidas		1,0
Descripción del trabajo autónomo del alumno			
Contenido/Tema			
	Tema 5. Simetría molecular. Elementos de simetría. Clasificación de las moléculas por simetría. Aplicación de la simetría a la teoría de orbitales moleculares.		
Modalidades Organizativas y Metodología de Trabajo			
<i>Modalidad Organizativa</i>	<i>Procedimientos y Actividades Formativas</i>	<i>Observaciones</i>	<i>Horas Pres./On line</i>
Grupo Docente	Clases magistrales/participativas		1,0
Grupo de Trabajo/Grupo Reducido	Seminarios y actividades académicamente dirigidas		1,0

Puede verificar la autenticidad, validez e integridad de este documento en la dirección:
<https://verificarfirma.ual.es/verificarfirma/code/gytoDBP7oiV3bfZT4XfAiw==>

Firmado Por	Universidad De Almeria	Fecha	23/07/2015
ID. FIRMA	blade39adm.ual.es	PÁGINA	5/8
			
gytoDBP7oiV3bfZT4XfAiw==			

Descripción del trabajo autónomo del alumno			
Bloque	Espectroscopía Molecular		
Contenido/Tema			
	<p>Tema 6. Espectros rotacionales y vibracionales.</p> <p>Intensidad y ancho de las líneas de los espectros. Espectros de rotación pura. Espectros de vibración de moléculas diatómicas. Espectros de vibración de moléculas poliatómicas.</p>		
Modalidades Organizativas y Metodología de Trabajo			
<i>Modalidad Organizativa</i>	<i>Procedimientos y Actividades Formativas</i>	<i>Observaciones</i>	<i>Horas Pres./On line</i>
Grupo Docente	Clases magistrales/participativas		3,0
Grupo de Trabajo/Grupo Reducido	Resolución de problemas		2,0
Descripción del trabajo autónomo del alumno			
Contenido/Tema			
	<p>Tema 7. Espectros electrónicos.</p> <p>Espectros electrónicos de moléculas diatómicas. Espectros electrónicos de moléculas poliatómicas. Fluorescencia y fosforescencia</p>		
Modalidades Organizativas y Metodología de Trabajo			
<i>Modalidad Organizativa</i>	<i>Procedimientos y Actividades Formativas</i>	<i>Observaciones</i>	<i>Horas Pres./On line</i>
Grupo Docente	Clases magistrales/participativas		3,0
Grupo de Trabajo/Grupo Reducido	Resolución de problemas		2,0
Descripción del trabajo autónomo del alumno			
Contenido/Tema			
	<p>Tema 8. Espectroscopia de resonancia magnética.</p> <p>Efecto de los campos magnéticos en los electrones y los núcleos. Espectroscopía de resonancia magnética nuclear. Resonancia paramagnética electrónica.</p>		
Modalidades Organizativas y Metodología de Trabajo			
<i>Modalidad Organizativa</i>	<i>Procedimientos y Actividades Formativas</i>	<i>Observaciones</i>	<i>Horas Pres./On line</i>
Grupo Docente	Clases magistrales/participativas		3,0
Grupo de Trabajo/Grupo Reducido	Resolución de problemas		2,0
Descripción del trabajo autónomo del alumno			
Contenido/Tema			
	<p>Tema 9. Principios de la termodinámica estadística.</p> <p>Distribución de los estados moleculares. Energía interna y entropía. La función de distribución canónica.</p>		
Modalidades Organizativas y Metodología de Trabajo			
<i>Modalidad Organizativa</i>	<i>Procedimientos y Actividades Formativas</i>	<i>Observaciones</i>	<i>Horas Pres./On line</i>
Grupo Docente	Clases magistrales/participativas		2,0
Grupo de Trabajo/Grupo Reducido	Resolución de problemas		1,0
Descripción del trabajo autónomo del alumno			
Contenido/Tema			
	<p>Tema 10. Aplicaciones de la termodinámica estadística.</p> <p>Funciones termodinámicas. Funciones de partición molecular. Energías medias. Capacidades caloríficas. Ecuaciones de estado. Constantes de equilibrio</p>		
Modalidades Organizativas y Metodología de Trabajo			
<i>Modalidad Organizativa</i>	<i>Procedimientos y Actividades Formativas</i>	<i>Observaciones</i>	<i>Horas Pres./On line</i>
Grupo Docente	Clases magistrales/participativas		2,0
Grupo de Trabajo/Grupo Reducido	Resolución de problemas		1,0
Descripción del trabajo autónomo del alumno			
Contenido/Tema			
	<p>Tema 10. Aplicaciones de la termodinámica estadística.</p> <p>Funciones termodinámicas. Funciones de partición molecular. Energías medias. Capacidades caloríficas. Ecuaciones de estado. Constantes de equilibrio</p>		
Modalidades Organizativas y Metodología de Trabajo			
<i>Modalidad Organizativa</i>	<i>Procedimientos y Actividades Formativas</i>	<i>Observaciones</i>	<i>Horas Pres./On line</i>
Grupo Docente	Clases magistrales/participativas		2,0
Grupo de Trabajo/Grupo Reducido	Resolución de problemas		1,0
Descripción del trabajo autónomo del alumno			

Puede verificar la autenticidad, validez e integridad de este documento en la dirección:
<https://verificarfirma.ual.es/verificarfirma/code/gytoDBP7oiV3bfZT4XfAiw==>

Firmado Por

Universidad De Almería

Fecha

23/07/2015

ID. FIRMA

blade39adm.ual.es

gytoDBP7oiV3bfZT4XfAiw==

PÁGINA

6/8



gytoDBP7oiV3bfZT4XfAiw==

PROCEDIMIENTO DE EVALUACIÓN DE LAS COMPETENCIAS

Criterios de Evaluación

Para las competencias establecidas en la guía docente los criterios de evaluación son los siguientes:

1. Capacidad para resolver problemas. En las pruebas realizadas durante el curso y en el examen final se incluirá una parte de problemas que representará un cincuenta por ciento del contenido del ejercicio. Además después de cada tema se propondrá a los alumnos una relación de problemas que deberán entregar resueltos en el plazo fijado en clase.

2. Comprender y poseer conocimientos. Se evaluará en las pruebas realizadas durante el curso, en el examen final y en las tutorías obligatorias fijadas durante el curso.

Las tres competencias siguientes que incluyen los conocimientos específicos de la asignatura se evaluarán mediante las pruebas periódicas que se realizarán y mediante una prueba final de opción múltiple.

Porcentajes de Evaluación de las Actividades a realizar por los alumnos

	Actividad	(Nº horas)	Porcentaje
I. ACTIVIDADES DEL ESTUDIANTE (Presenciales / Online)	• Gran Grupo	(0)	0 %
	• Grupo Docente	(26)	40 %
	• Grupo de Trabajo/Grupo Reducido	(19)	50 %
II. ACTIVIDADES NO PRESENCIALES DEL ESTUDIANTE (Trabajo autónomo)	• (Trabajo en grupo, Trabajo individual)	(105)	10 %

Instrumentos de Evaluación

- Pruebas, ejercicios, problemas.
- Pruebas finales (escritas u orales).
- Pruebas finales de opción múltiple.

Mecanismos de seguimiento

- Asistencia a tutorías
- Alta y acceso al aula virtual
- Entrega de actividades en aula virtual

Puede verificar la autenticidad, validez e integridad de este documento en la dirección:
<https://verificarfirma.ua.es/verificarfirma/code/gytoDBP7oiV3bfZT4XfAiw==>

Firmado Por

Universidad De Almeria

Fecha

23/07/2015

ID. FIRMA

blade39adm.ua.es

gytoDBP7oiV3bfZT4XfAiw==

PÁGINA

7/8



gytoDBP7oiV3bfZT4XfAiw==

BIBLIOGRAFÍA

Bibliografía recomendada

Fisicoquímica (*Ira N. Levine*) - Bibliografía básica
Molecular Quantum Mechanics (*P. W. Atkins, R.S. Friedman*) - Bibliografía complementaria
Química cuántica : Fundamentos y aplicaciones computacionales (*Joan Bertran Rusca*) - Bibliografía complementaria
Química Física (*Peter Atkins, Julio de Paula.*) - Bibliografía básica
Química Física I (*Joan Bertran Rusca, Javier Núñez Delgado*) - Bibliografía complementaria
Química Física II (*Joan Bertran Rusca, Javier Núñez Delgado*) - Bibliografía complementaria

Bibliografía existente en el Sistema de Información de la Biblioteca de la UAL

Puede ver la bibliografía existente en la actualidad en el Sistema de Gestión de Biblioteca consultando en la siguiente dirección:

<http://almirez.ual.es/search/x?SEARCH=50903215>

DIRECCIONES WEB

- <http://http://simons.hec.utah.edu/TheoryPage/index.html>
Página de Química Teórica del Profesor Simons
- <http://vergil.chemistry.gatech.edu/notes/quantrev/quantrev.html>
Revisión de Química Cuántica
- http://www.ccc.uga.edu/lec_top/
Lecciones de Química Cuántica del Centro de Química Computacional de Georgia

Puede verificar la autenticidad, validez e integridad de este documento en la dirección:
<https://verificarfirma.ual.es/verificarfirma/code/gytoDBP7oiV3bfZT4XfAiw==>

Firmado Por

Universidad De Almeria

Fecha

23/07/2015

ID. FIRMA

blade39adm.ual.es

gytoDBP7oiV3bfZT4XfAiw==

PÁGINA

8/8



gytoDBP7oiV3bfZT4XfAiw==