



Identificació de l'assignatura

Assignatura	21408 - Química Física I
Crèdits	2,4 de presencials (60 hores) 3,6 de no presencials (90 hores) 6 de totals (150 hores).
Grup	Grup 1, 1S, GQUI (Campus Extens)
Període d'impartició	Primer semestre
Idioma d'impartició	Castellà

Professors

Professor/a	Horari d'atenció als alumnes					
	Hora d'inici	Hora de fi	Dia	Data d'inici	Data de fi	Despatx
Josefa Laurentina Donoso Pardo josefa.donoso@uib.es	15:00h	16:00h	Dilluns	22/09/2014	21/07/2015	Ed. Mateu Orfila. QF-107

Contextualització

L'assignatura de Química Física I, programada en el primer semestre del segon curs dels estudis de grau de Química, forma part del mòdul de *Química Física*, de caràcter fonamental per l'alumnat de la titulació de Graduat/da en Química. El subtítol d'aquesta assignatura, Química Quàntica i Espectroscòpia, és realment un resum dels seus continguts temàtics.

A l'assignatura de Química II, al segon quadrimestre del primer curs de la titulació, se van presentar a l'alumnat les bases teòriques que permeten entendre l'estructura electrònica d'àtoms i molècules i explicar el comportament macroscòpic de la matèria.

En aquesta nova assignatura s'amplien aquestes bases i s'apliquen els postulats de la Mecànica Quàntica per estudiar l'estat dels electrons i els nuclis en els àtoms i la interacció entre la radiació electromagnètica i la matèria, la qual cosa permetrà donar una interpretació microscòpica dels resultats obtinguts ambdiverses tècniques espectroscòpiques: microones, infraroig, ultraviolat-visible d'absorció i emissió, espectroscòpia fotoelectrònica, fluorescència, dispersió Raman, espectroscòpia de ressonància magnètica, etc. L'enorme amplitud de tot aquest tipus de tècniques és gairebé incompatible amb la breu extensió de l'assignatura, de manera que al curs no s'abordaran algunes d'aquestes tècniques o se farà d'una manera molt superficial.

L'assignatura també fa una breu introducció de les actuals metodologies en Química Quàntica que permeten d'una manera molt fiable la modelització molecular i l'obtenció de paràmetres moleculars (geometria de mínima energia, moment dipolar molecular, energia dels OMs, etc) d'utilitat per entendre i justificar l'estabilitat i reaccionabilitat molecular.

Se podria dir que la Química Física I és l'assignatura bàsica que ens donarà les eines per poder abordar justificadament el comportament de la matèria orgànica i inorgànica



L'assignatura forma part del projecte Campus Extens de la Universitat de les Illes Balears.

Requisits

L'assignatura no té requisits de matrícula i qualsevol alumne al segon any de la titulació de Grau de Química podria matricular-se.

No obstant i atès el contingut que se treballa en aquest curs, per tal de treure el màxim profit, és molt recomanable tenir els coneixements requerits per aprovar les dues assignatures de matemàtiques del primer curs de la titulació, així com els requerits per aprovar les dues assignatures de físiques del mateix curs. D'altra banda i atès que molts dels conceptes que se treballaran en aquest curs se fonamenten sobre altres ja tractats a la Química II del primer curs, és també molt recomanable tenir-ne aprovada l'assignatura.

És evident que no és imprescindible tenir aprovades totes aquestes assignatures per cursar Química Física I, però és evident que si no se'n tenen, l'esforç addicional que haurà de fer l'alumne per seguir l'assignatura serà considerable.

Recomanables

- Haver cursat i aprovat *Química II*
- Haver cursat i aprovat *Matemàtiques I i II*
- Haver cursat i aprovat *Física I i II*
- Tenir coneixements d'Informàtica a nivell d'usuari

Competències

L'objectiu fonamental de l'assignatura és que l'alumne coneixgui i entengui les teories actuals que justifiquen el comportament microscòpic i macroscòpic de la matèria i sap utilitzar els seus postulats i el seu formalisme per saber resoldre problemes reals o suposats d'espectroscòpia atòmica i molecular i d'estructura de la matèria.

Addicionalment, l'alumnat ha de treballar altres competències de caire genèric, que seran d'utilitat en el seu exercici professional.

Aquestes competències genèriques i específiques que es descriuen a continuació són les que estan definides al Pla d'Estudis de Grau en Química

Específiques

- * CB-1: Demostrar tenir i comprendre coneixements a l'àrea de la Química a partir de la base de l'ensenyament a secundària, a un nivell que, si bé es basa en llibres de text avançats, inclou també alguns dels aspectes que impliquen coneixements procedents de l'avantguarda en l'estudi de la Química..
- * CB-3: Tenir la capacitat de reunir i interpretar dades rellevants, dins de l'àrea de la Química, per emetre judicis amb una reflexió sobre temes rellevants d'àmbit social, científic o ètic..
- * CB-4. Poder transmetre informació, idees, problemes i solucions de l'àmbit químic a un públic tant especialitzat com no especialitzat.
- * CE1-C: Coneixement de la terminologia química: nomenclatura, termes, convenis i unitats..
- * CE2-C: Coneixement dels principis físico-químics fonamentals que regeixen la Química i les seves relacions entre àrees de la Química..



- * CE7-C: Coneixement dels principis matemàtics i físics bàsics necessaris per a la Química..
- * CE1-H: Demostrar coneixement i la seva comprensió per a l'aplicació pràctica dels fets essencials, conceptes, principis i teories de la Química..
- * CE2-H: Demostrar habilitats per a identificar i resoldre problemes qualitius i quantitius amb un enfocament estratègic..
- * CE6-H: Demostrar habilitats per als càlculs numèrics i la seva interpretació de les dades experimentals, amb especial èmfasi en la precisió i l'exactitud..

Genèriques

- * CT-1: Capacitat de comunicació (oral i escrita) en la llengua oficial i en anglès..
- * CT-2: Capacitat de treballar en equip (multidisciplinar o no)..
- * CT-3: Capacitat per a la gestió de dades i la generació d'informació/coneixement (ús eficaç i eficient de les TICs i d'altres recursos)..
- * CT-5: Capacitat de resolució eficaç i eficient de problemes demostrant principis d'originalitat i autodirecció..
- * CT-6: Capacitat d'anàlisi i síntesi..

Bàsiques

- * Podeu consultar les competències bàsiques que l'estudiant ha d'haver assolit en acabar el grau a l'adreça següent: http://estudis.uib.cat/ca/grau/comp_basiques/

Continguts

El desenvolupament dels continguts en temes didàctics respon a la descripció de continguts establerts al Pla d'estudis de Grau en Química.

Continguts temàtics

Tema 0. Revisió d'alguns conceptes matemàtics

Tema 1. Bases de la Mecànica Quàntica

Els postulats de la Mecànica Quàntica

Tema 2. Un model mecanoquàntic per moviment traslacional molecular

La partícula lliure, la partícula dins un pou de potencial infinit d'una, dues i tres dimensions.

La partícula dins un pou de potencial finit: efecte túnel

Tema 3. Introducció a l'espectroscòpia

Naturalitat de la radiació electromagnètica

Característiques de les línies i bandes espectrals atòmiques i moleculars

Tema 4. Un model mecanoquàntic per al moviment vibracional molecular. Espectroscòpia vibracional

L'oscilador armònic

Modos normals de vibració moleculars

Espectroscòpia vibracional

Tema 5.. Un model mecanoquàntic de la rotació molecular. Espectroscòpia rotacional

L'operador Moment angular. Sistemes de forces centrals. El rotor rígida

Espectroscòpia rotacional



Espectroscòpia de vibració-rotació

Tema 6. Àtoms hidrogenoids. Espectroscòpia d'àtoms amb un electró
L'àtom hidrogenoid.

L'espín electrònic

Espectroscòpia de l'àtom d'hidrogen i hidrogenoids

Tema 7. Àtoms polieletrònics
L'àtom polieletrònic. El mètode del Camp Autoconsistent (SCF)

Acoblament de moments angulars i d'espín

Espectroscòpia d'àtoms polieletrònics

Tema 8. Enllaç químic I. Molècules diatòmiques
El Hamiltonià molecular.

La teoria d'Orbitals Moleculars. El mètode de Combinació Linear d'Orbitals Atòmics (CLOA): aplicació a les molècules diatòmiques. El mètode SCF-Hartree-Fock: aplicació a molècules diatòmiques

Tema 9. Enllaç Químic II. Molècules poliatòmiques
Exemples del tractament OM-CLOA de la determinació de la funció d'ona electrònica de molècules poliatòmiques

L'aproximació pi-electrònica per a molècules amb dobles enllaços conjugats. Mètode de Hückel

Tema 10. Espectroscòpia electrònica molecular
L'Espectroscòpia electrònica de les molècules diatòmiques.
L'espectroscòpia electrònica de les molècules poliatòmiques
Espectroscòpia de fluorescència.

Tema 11. Espectroscòpia de Resonància Magnètica
La resonància magnètica nuclear (RMN). El desplaçament químic. L'acoblament d'espín
La resonància d'espín electrònics

Metodologia docent

A aquest apartat es defineixen les activitats a realitzar.

Activitats de treball presencial

Modalitat	Nom	Tip. agr.	Descripció	Hores
Classes teòriques	Teòriques	Grup gran (G)	El professor explicarà els conceptes i procediments dels continguts de l'assignatura establerts al programa. Per a la qual cosa se servirà de: * Projectes de documents Power Point	40



Modalitat	Nom	Tip. agr.	Descripció	Hores
			* Pissarra per mostrar els raonaments i la resolució de problemes numèrics i/o conceptuals * Vídeos didàctics Per aprofitar adequadament les classes expositives és necessari una "assistència activa", la qual cora requereix seguir el raonament del professor, fer les anotacions que siguin necessàries, realitzar, seguint el professor, les demostracions pertinents, etc.	
Seminaris i tallers	Problemes	Grup mitjà (M)	Paral·lelament al desenvolupament dels continguts teòrics, es realitzaran problemes numèrics relacionats amb els continguts de l'assignatura. Els exercicis que se faran en aquest seminaris estaran enunciats amb prou antelació per a que l'alumnat els hi pugui haver treballat i per tant tingui una participació activa en les sessions	7.5
Tutories ECTS	Tutories	Grup mitjà (M)	Tutories en grup mitjà o petit on el professor resoldrà els dubtes de l'alumnat sobre els continguts del programa i sobre la resolució dels exercicis proposats.	7
Avaluació	Prova final d'avaluació escrita	Grup gran (G)	Prova escrita d'avaluació al final del període lectiu.	4
Avaluació	Prova parcial d'avaluació escrita	Grup gran (G)	Es realitzarà un control durant el semestre per comprovar el nivell de coneixement assolit per l'alumnat.	1.5

A començament del semestre hi haurà a disposició dels estudiants el cronograma de l'assignatura a través de la plataforma UIBdigital. Aquest cronograma inclourà almenys les dates en què es faran les proves d'avaluació contínua i les dates de lliurament dels treballs. A més, el professor o la professora informará els estudiants si el pla de treball de l'assignatura es durà a terme a través del cronograma o per una altra via, inclosa la plataforma Campus Extens.

Activitats de treball no presencial

Modalitat	Nom	Descripció	Hores
Estudi i treball autònom individual	Treball autònom	L'alumne treballarà els conceptes desenvolupats a les classes teòriques, de problemes i els seminaris per arribar a aconseguir el nivell d'assoliment desitjat.	50
Estudi i treball autònom en grup	Resolució de problemes	Resolució de les qüestions i problemes numèrics proposats sobre els continguts de l'assignatura.	40



Riscs específics i mesures de protecció

Les activitats d'aprenentatge d'aquesta assignatura no comporten riscos específics per a la seguretat i salut dels alumnes i, per tant, no cal adoptar mesures de protecció especials.

Avaluació de l'aprenentatge dels estudiants

- * Per aprovar l'assignatura s'ha d'aconseguir un **4,0 (sobre 10.0) com a nota mínima de la prova final**.
- * La qualificació final de l'assignatura s'aconsegueix amb la suma ponderada de tots els elements d'avaluació.
- * L'assignatura estarà aprovada si aquesta suma ponderada és igual o superior a 5,0

Problemes

Modalitat	Seminaris i tallers
Tècnica	Proves objectives (recuperable)
Descripció	Paral·lelament al desenvolupament dels continguts teòrics, es realitzaran problemes numèrics relacionats amb els continguts de l'assignatura. Els exercicis que se faran en aquest seminaris estaran enunciats amb prou antelació per a que l'alumnat els hi pugui haver treballat i per tant tingui una participació activa en les sessions
Criteris d'avaluació	Se realitzaran al menys 3 proves curtes de resolució individual de problemes i preguntes de resposta breu al llarg del curs, per tal de tenir un paràmetre sobre la progressió de l'alumnat. La qualificació mitjana d'aquestes proves ha de ser igual o superior a 3,0 (sobre 10 punts totals) per poder aprovar l'assignatura. La recuperació d'aquest element d'avaluació es realitzarà durant el període extraordinari d'avaluació el dia fixat per l'autoritat acadèmica (juliol)

Percentatge de la qualificació final: 20%

Tutories

Modalitat	Tutories ECTS
Tècnica	Tècniques d'observació (no recuperable)
Descripció	Tutories en grup mitjà o petit on el professor resoldrà els dubtes de l'alumnat sobre els continguts del programa i sobre la resolució dels exercicis proposats.
Criteris d'avaluació	S'observarà l'actitud i el progrés de l'alumnat al llarg del curs en les activitats de tutories. Se tindrà molt en compte les tutories en grup més reduït. El lideratge en la resolució dels problemes proposats. L'actitud davant dels resultats de les proves objectives, etc.

Percentatge de la qualificació final: 10%

Prova final d'avaluació escrita

Modalitat	Avaluació
Tècnica	Proves de resposta llarga, de desenvolupament (recuperable)
Descripció	Prova escrita d'avaluació al final del període lectiu.
Criteris d'avaluació	Es realitzarà una prova final escrita on s'avaluaran els coneixements teòrics assolits i la seva aplicació a la resolució de problemes. És necessari obtenir un mínim d'un 4.0 (sobre 10.0) d'aquesta activitat obligatòria per



Any acadèmic	2014-15
Assignatura	21408 - Química Física I
Grup	Grup 1, IS, GQUI
Guia docent	A
Idioma	Català

poder promediar amb les altres activitats del curs. L'activitat és recuperable en la data establerta per les autoritats acadèmiques (juliol).

Percentatge de la qualificació final: 45%

Prova parcial d'avaluació escrita

Modalitat	Avaluació
Tècnica	Proves de resposta llarga, de desenvolupament (no recuperable)
Descripció	Es realitzarà un control durant el semestre per comprovar el nivell de coneixement assolit per l'alumnat.
Criteris d'avaluació	Es realitzarà una prova parcial escrita, en la data programada per les autoritats acadèmiques, on s'avaluaran els coneixements teòrics assolits i la seva aplicació a la resolució de problemes.

Percentatge de la qualificació final: 25%

Recursos, bibliografia i documentació complementària

Bibliografia bàsica

Fisicoquímica. Volum II. 5ª edición. Ira N. Levine. Ed. McGrawHill. Madrid (2004)
Química Física (8a edición); *P. Atkins y J. de Paula* ; Panamericana, Buenos Aires (2008)
Química Física (1ª edición) *T. Engel, P. Reid and W. Hehre* . Pearson Education. Madrid (2006)
Fundamentals of Molecular Spectroscopy (4th edition); *C.N. Banwell*; Mc Graw-Hill (1994)
Problemas de Fisicoquímica. 1ª edición. *Ira N. Levine*. Ed. McGrawHill. Madrid (2005)

Bibliografia complementària

Química Física. Vol I y II. *J. Delgado y J. Bertran*. Ariel. Madrid (2002)
Problemas de Química Física. *J. Delgado y J. Bertran*. Delta. publicaciones universitarias. Madrid (2007)
Espectroscopia. *A. Requena y J. Zúñiga*. Pearson. Prentice Hall. Madrid. 2003
Química Cuántica; *I.N. Levine*; Prentice Hall, Madrid (2001)
Química Cuántica; *J. Bertrán, V. Branchadell, M. Moreno, M. Sodupe*; Ed. Síntesis, Madrid (2000)
Modern Spectroscopy. *J. L. McHale*. Prentice Hall. 1999
Modern Spectroscopy (3rd edition); *J.M. Hollas*; John Wiley (1996)
Physical Chemistry. 2nd ed. *R. Berry, S. Rice, J. Ross*. Ed: Oxford University Press (Oxford, 2000)
Symmetry and spectroscopy. An introduction to vibrational and electronic spectroscopy. *D. Harris and M. Bertolucci*. Oxford University Press. New York (1989)

Altres recursos

Material a la pàgina de l'assignatura en Campus Extens.