



Identificació de l'assignatura

Assignatura	21408 - Química Física I
Crèdits	2.4 presencials (60 hores) 3.6 no presencials (90 hores) 6 totals (150 hores).
Grup	Grup 1, 1S(Campus Extens)
Període d'impartició	Primer semestre
Idioma d'impartició	Català

Professors

Professors	Horari d'atenció alumnat					
	Hora d'inici	Hora de fi	Dia	Data d'inici	Data de fi	Despatx
Juan Frau Munar juan.frau@uib.es	16:00h	17:00h	Dilluns	24/09/2012	30/06/2013	QF108

Titulacions on s'imparteix l'assignatura

Titulació	Caràcter	Curs	Estudis
Grau de Química	Obligatòria	Segon curs	Grau

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.

Els continguts de l'assignatura es poden separar en dos grans blocs. Per una part, la Química Quàntica i per l'altra l'Espectroscopia. Pel que fa referència a la Química Quàntica, s'aprofundirà en alguns aspectes de la Química prèviament introduïts a l'assignatura Química II de primer curs com són la introducció a la Química Quàntica i l'estudi de sistemes atòmics monoelectrònics. Posteriorment, els fonaments quàntics s'aplicaran per anar explicant els àtoms polielectrònics i els sistemes moleculars. Aquests coneixements són fonamentals per poder explicar posteriorment les diferents tècniques espectroscòpiques: espectrocòpia de microones (rotació), espectrocòpia d'infraroig (vibració), espectroscopia UV-Vis (electrònica).

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

Requisits

L'assignatura no té requisits de matrícula. No obstant, a continuació s'enumeren una sèrie de recomanacions per poder garantir el seguiment i la superació de l'assignatura. En aquest sentit cal indicar que l'estudi de la Química Quàntica requereix d'uns desenvolupaments teòrics basats en la resolució d'equacions diferencials.

Recomanables

- Haver cursat Química II





- Haver cursat Matemàtiques I i II
- Haver cursat Física I i II
- Informàtica a nivell d'usuari

Competències

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

Específiques

1. 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..
2. 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..
3. CE1-C: Coneixement de la terminologia química: nomenclatura, termes, convenis i unitats..
4. CE2-C: Coneixement dels principis físico-químics fonamentals que regeixen la Química i les seves relacions entre àrees de la Química..
5. CE7-C: Coneixement dels principis matemàtics i físics bàsics necessaris per a la Química..
6. CE1-H: Demostrar coneixement i la seva comprensió per a l'aplicació pràctica dels fets essencials, conceptes, principis i teories de la Química..
7. CE2-H: Demostrar habilitats per a identificar i resoldre problemes qualitius i quantitatius amb un enfocament estratègic..
8. 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

1. CT-1: Capacitat de comunicació (oral i escrita) en la llengua oficial i en anglès..
2. CT-2: Capacitat de treballar en equip (multidisciplinar o no)..
3. 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)..
4. CT-5: Capacitat de resolució eficaç i eficient de problemes demostrant principis d'originalitat i autodirecció..
5. CT-6: Capacitat d'anàlisi i síntesi..

Continguts

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

Continguts temàtics

Tema 1. Introducció a la Mecànica Quàntica

- * Orígens de la Mecànica Quàntica.
- * Dualisme ona-còrpuscle de la radiació electromagnètica.



- * Hipòtesi de L. de Broglie.
- * Dinàmica de sistemes microscòpics.
- * Postulats de la Mecànica Quàntica.

Tema 2. Aplicació de la Mecànica Quàntica a la resolució de problemes físics senzills

- * La partícula en una fossa de potencial infinit (caixa d'una dimensió).
- * La partícula lliure.
- * La partícula en una fossa de potencial finit: efecte túnel.
- * La partícula en una caixa de tres dimensions.
- * L'oscil·lador harmònic.

Tema 3. Camp de forces centrals

- * El moment angular a la Mecànica Clàssica.
- * El moment angular a la Mecànica Quàntica.
- * El rotor rígid.
- * Quantització espacial.

Tema 4. L'àtom d'hidrogen

- * Equació de Schrödinger de l'àtom d'hidrogen i hidrogenoids.
- * Funcions radials dels àtoms hidrogenoids.
- * Orbitals hidrogenoids.
- * L'espí de l'electró.

Tema 5. Àtoms polieletrònics

- * El principi de Pauli.
- * Mètodes aproximats a la Mecànica Quàntica: mètode de perturbacions i mètode de variacions.
- * Aplicació del mètode de variacions a l'àtom d'Heli.
- * Funció d'ona de l'àtom de liti.
- * El mètode del camp auto-consistent (SCF): mètode de Hartree, mètode de Hartree-Fock.

Tema 6. Espectroscopia Atòmica

- * Fonaments de l'absorció i emissió de radiació.
- * Espectre de l'àtom d'hidrogen i hidrogenoids.
- * Addició de moments angulars.
- * Operador moment angular en àtoms polieletrònics.
- * Termes espectrals.
- * Moment magnètic en àtoms polieletrònics.

Tema 7. Estructura electrònica de molècules diatòmiques

- * Aproximació de Born-Oppenheimer.
- * Molècula d'ió hidrogen.
- * Teoria d'Orbitals Moleculars de molècules diatòmiques homonuclears.
- * Teoria d'Orbitals Moleculars de molècules diatòmiques heteronuclears.
- * Funcions d'ona SCF de HF.

Tema 8. Estructura electrònica de molècules poliatòmiques

- * Tractament OM-SCF de molècules poliatòmiques.
- * Càlcul de propietats moleculars.

Tema 9. Introducció a l'Espectroscopia Molecular

- * Interacció radiació electromagnètica i matèria.
- * Característiques de les línies espectrals.

Tema 10. Espectroscopia de Microones (rotació)

- * Introducció: el moment d'inèrcia.
- * Molècules diatòmiques: el rotor rígid, el rotor no rígid.
- * Molècules poliatòmiques: linials, trompo simètriques, trompo esfèriques i trompo asimètriques.
- * Aplicacions de l'espectroscopia de microones.
- * Instrumentació de l'espectroscopia de microones.

Tema 11. Espectroscopia d'Infraroig (vibració)

- * Molècules diatòmiques: l'oscil.lador harmònic, l'oscil.lador anarmònic.
- * Molècules poliatòmiques.
- * Aplicacions de l'espectroscopia IR.
- * Instrumentació de l'espectroscopia IR.

Tema 12. Espectroscopia Raman

- * Teoria clàssica de l'efecte Raman.
- * Teoria quàntica de l'efecte Raman.
- * Raman de rotació pura.
- * Raman de vibració.
- * Aplicacions de l'espectroscopia Raman.
- * Instrumentació de l'espectroscopia Raman.

Tema 13. Espectroscopia Electrònica

- * Espectroscopia electrònica de molècules diatòmiques: principi de Franck-Condon.
- * Espectroscopia electrònica de molècules poliatòmiques.
- * Aplicacions de l'espectroscopia UV-Visible.
- * Instrumentació de l'espectroscopia UV-Visible.
- * Processos en estats electrònicament excitats.

Metodologia docent

A aquest apartat es defineixen les activitats a realitzar.

Activitats de treball presencial

Modalitat	Nom	Tip. agr.	Descripció
Classes teòriques	Teòriques	Grup gran (G)	El professor amb l'ajut de presentacions power point i altres programes de software didàctic desenvoluparà els continguts recollits al temari.
Classes pràctiques	Problemes	Grup gran (G)	Es realitzaran problemes numèrics relacionats amb els continguts teòrics de l'assignatura.
Tutories ECTS	Seminaris	Grup mitjà (M)	Es tracta de consolidar els coneiximents impartits a les classes teòriques i també s'aprofitaran per aprofundir en alguns aspectes.
Avaluació	Prova final d'avaluació escrita	Grup gran (G)	Prova escrita d'avaluació al final del període lectiu.
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.



Activitats de treball no presencial

Modalitat	Nom	Descripció
Estudi i treball autònom individual	Resolució i lliurament de problemes	Resolució d'un conjunt de problemes (tipus B).
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.

Riscs específics i mesures de protecció

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

Estimació del volum de treball

Modalitat	Nom	Hores	ECTS	%
Activitats de treball presencial		60	2.4	40
Classes teòriques	Teòriques	40	1.6	26.67
Classes pràctiques	Problemes	7.5	0.3	5
Tutories ECTS	Seminaris	7	0.28	4.67
Avaluació	Prova final d'avaluació escrita	3	0.12	2
Avaluació	Prova parcial d'avaluació escrita	2.5	0.1	1.67
Activitats de treball no presencial		90	3.6	60
Estudi i treball autònom individual	Resolució i lliurament de problemes	40	1.6	26.67
Estudi i treball autònom individual	Treball autònom	50	2	33.33
Total		150	6	100

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.

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 i la suma de l'avaluació de totes les activitats ha de ser igual o superior a 5.0.



La prova escrita final i les tutories ECTS (amb un mínim d'assistència del 70 %) són elements obligatoris del procés d'avaluació.

La recuperació de la prova final d'avaluació escrita es realitzarà el mes de febrer o març. S'anunciarà amb antelació el dia de la seva realització

Seminaris

Modalitat	Tutories ECTS
Tècnica	Tècniques d'observació (No recuperable)
Descripció	Es tracta de consolidar els coneixements impartits a les classes teòriques i també s'aprofitaran per aprofundir en alguns aspectes.
Criteris d'avaluació	Reforçament de coneixements i aprofundiment en alguns aspectes concrets de l'assignatura. És necessari una assistència mínima del 70 % per poder ser avaluat d'aquesta activitat obligatòria. Als seminaris es resol·luren els exercicis teòrics de tipus A.

Percentatge de la qualificació final: 10% per l'itinerari A

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 i la seva aplicació a la resolució de problemes assolits. És necessari obtenir un mínim d'un 4.0 (sobre 10.0) d'aquesta activitat obligatòria per poder promediar amb les altres activitats. La recuperació d'aquesta activitat no es farà el mes de setembre.

Percentatge de la qualificació final: 40% per l'itinerari A

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 (20%) on s'avaluaran els coneixements teòrics i la seva aplicació a la resolució de problemes assolits.

Percentatge de la qualificació final: 25% per l'itinerari A

Resolució i lliurament de problemes

Modalitat	Estudi i treball autònom individual
Tècnica	Proves objectives (No recuperable)
Descripció	Resolució d'un conjunt de problemes (tipus B).
Criteris d'avaluació	Resolució i lliurament d'un conjunt de problemes (aprox. 50).

Percentatge de la qualificació final: 25% per l'itinerari A

Recursos, bibliografia i documentació complementària





Any acadèmic	2012-13
Assignatura	21408 - Química Física I
Grup	Grup 1, 1S
Guia docent	A
Idioma	Català

Bibliografia bàsica

Química Física (8a edició); P. Atkins y J. de Paula; Panamericana, Buenos Aires (2008)
Físico Química (5a. edició); I. Levine; Mc Graw Hill, Madrid (2004)
Química Cuántica; I.N. Levine; Prentice Hall, Madrid (2001)

Bibliografia complementària

Fundamentals of Molecular Spectroscopy (4th edition); C.N. Banwell; Mc Graw-Hill (1994)
Modern Spectroscopy (3rd edition); J.M. Hollas; John Wiley (1996)
Química Cuántica; J. Bertrán, V. Branchadell, M. Moreno, M. Sodupe; Ed. Síntesis, Madrid (2000)

Altres recursos

Material que estarà disponible a Campus Extens.