



Any acadèmic	2013-14
Assignatura	21408 - Química Física I
Grup	Grup 1, 1S, GQUI
Guia docent	A
Idioma	Català

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, GQUI(Campus Extens)
Període d'impartició	Primer semestre
Idioma d'impartició	Castellà

Professors

Professors	Horari d'atenció alumnat					
	Hora d'inici	Hora de fi	Dia	Data d'inici	Data de fi	Despatx
Josefa Laurentina Donoso Pardo josefa.donoso@uib.es				No hi ha sessions definides		

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*, de caràter fonamental per l'alumant 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 els moviments 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 amb les diverses tècniques espectroscòpiques: microones, infraroig i ultraviolat-visible d'absorció, espectroscòpia atòmica d'emissió, espectroscòpia fotoelectrònica, fluorescència, dispersió Raman, espectroscòpia de ressonància magnètica, etc.

L'assignatura també s'estén en l'estudi 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 l'estabilitat i reaccionabilitat molecular.





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 per poder seguir sense dificultats els continguts temàtics de l'assignatura és recomanable complir els requisits que se llisten més abaix

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

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 establerts al Pla d'estudis de Grau en Química.

Continguts temàtics

Tema 1. Els postulats de la Mecànica Quàntica

- * Funcions d'onda, observables i operadors. Postulats 1, 2, 3 i 4 de la Mecànica Quàntica (MC)
- * La variació temporal d'un sistema mecanoquàntic: Postulat 5
- * Aplicació de la MC a l'estudi de sistemes simples: Partícula lliure, partícula en una fossa de potencial infinit (d'una, dos i tres dimensions), partícula en una fossa de potencial finit. Efecte túnel
- * El microscopi d'efecte túnel (Scanning tunneling microscope, STM)
- * Operadors que conmuten y que no conmuten. Principio de indeterminación de Heisenberg
- * Introducció a la espectroscòpia. El fonament de les transicions entre estats d'energia en els sistemes mecanoquàntics

Tema 2. Un model mecanoquàntic per a la rotació de molècules.

- * La resolució de la Ecuació de Schrödinger (ES) per a la rotació en dos i tres dimensions.
- * La quantització del moment angular.
- * Les funcions armòniques esfèriques.
- * Espectroscopia rotacional o de microones. Reglas de selecció
- * L'oscil·lador harmònic.

Tema 3. Un model mecanoquàntic per a la vibració molecular

- * Resolució de la ES per a l'oscil·lador armònic i anarmònic
- * Espectroscòpia vibracional. Regles de selecció.
- * Espectroscòpia d'absorció infraroja.
- * Espectroscòpia infraroja amb transformades de Fourier (FTIR).
- * Espectroscòpia de dispersió Raman

Tema 4. Estructura electrònica dels àtoms

- * Valors propis i funcions pròpies de l'operador Hamiltoniano d'un àtom monoelectrònic
- * L'Espin de l'electró. 6º postulat de la mecànica quàntica. Antisimetria de la funció electrònica d'un àtom polieletrònic
- * Obtenció de la funció d'ona total electrònica d'un àtom polieletrònic. El mètode de variacions i el del camp autoconsistent de Hartree-Fock (SCF-HF).
- * Comprensió de les tendències en la taula periòdica a partir dels càlculs HF.
- * El moment angular electrònic total i el moment d'espín electrònic total
- * Configuracions, tèrmes, nivells i estats
- * Influència de l'acoblament dels moments angulars i d'espín sobre l'energia electrònica

Tema 5. Espectroscòpia atòmica bàsica

- * Bases d'espectroscòpia atòmica. Regles de selecció
- * Espectres d'àtoms monoelectrònics.
- * Diagrames de Grottrian.
- * Tècniques analítiques basades en espectroscòpia atòmica.
- * Làsers i altres tècniques d'espectroscòpia atòmica



Tema 6. Estructura molecular. L'enllaç químic. I

- * L'aproximació de Born-Oppenheimer.
- * Funcions d'ona i energia en la molècula d'ió hidrogen. Orbitals enllaçants i antienllaçants
- * La molècula d'hidrogen. Les dues descripcions: model d'orbitals moleculars (OM) i d'enllaç de valència (EV)
- * Resolució de l'ES per a molècules polieletròniques. Model OM-CLOA
- * OM y diagrama de energia de los OM en moléculas diatómicas.
- * El potencial electrostático molecular.

Tema 7. Estructura molecular. L'enllaç químic. II

- * La descripció dels enllaços localitzats utilitzant orbitals atòmics híbrids (EV) .
- * Predicció de l'estructura molecular usant la teoria d'OM. Orbitals moleculars canònics i localitzats
- * Teoria d'Orbitals Moleculars qualitativa per a molècules amb enllaços conjugats i aromàtiques. El model de Hückel

Tema 8. Espectroscopia electrònica molecular

- * L'energia de les transicions electròniques. Regles de selecció en molècules diatòmiques
- * Estructura vibracional de les transicions electròniques moleculars. El principi de Franck-Condon
- * Absorció de llum UV-Visible en molècules poliatòmiques
- * Transicions singlet-singlet. Absorció i fluorescència
- * Aplicacions de l'espectroscòpia UV-visible d'absorció i fluorescència
- * Espectroscòpia fotoelectrònica molecular

Tema 9. Espectroscòpia de Resonància Magnètica

- * Moment d'espín nuclear intrínsec i moment magnètic
- * L'energia dels nuclis amb un espín no nul dins un camp magnètic. Resonància Magnètica Nuclear (RMN)
- * El desplaçament químic
- * Acoblament d'espins i desdoblament de pics de RMN
- * RMN en estat sòlid i d'imatge
- * RMN bidimensional
- * Resonància d'espín electrònic (RSE)

Apèndice. Tema 10. Química Computacional

- * Qué entendemos por Química Computacional
- * Modelos teóricos y química de los modelos teóricos
- * Más allá de la teoría de Hartree-Fock
- * Determinación de propiedades moleculares

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.





Modalitat	Nom	Tip. agr.	Descripció
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 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 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 5.0 (sobre 10.0) com a nota mínima de la prova final.
- * Per a la resta d'activitats avaluables s'ha d'aconseguir al manco una qualificació de 3 punts (sobre 10 totals)
- * Les tutories ECTS o seminaris són elements obligatoris del procés d'avaluació i és obligatori una assistència no inferior al 80% de les sessions programades
- * 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.

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 80 % per poder ser avaluat d'aquesta activitat obligatòria. Fonamentalment els seminaris s'utilitzaran per a la resolució de problemes numèrics i supòsits teòric-pràctics

Percentatge de la qualificació final: 5% 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 assolits i la seva aplicació a la resolució de problemes. És necessari obtenir un mínim d'un 5.0 (sobre 10.0) d'aquesta activitat obligatòria per poder promediar amb les altres activitats del curs. L'activitat és recuperable en la data establerta per les autoritats acadèmiques (setembre).

Percentatge de la qualificació final: 50% 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, en la data programada per les autoritats acadèmiques, 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 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	El seguiment al llarg del curs del grau d'assoliment de destreses per resoldre problemes numèrics i supòsits se realitzarà mitjançant proves objectives curtes d'uns 20-25 min que consistiran en la resolució en el aula de problemes. Les proves s'anunciaran amb una antelació d'una setmana. Se realitzaran un mínim de 4 proves al llarg del curs.

Percentatge de la qualificació final: 20% per l'itinerari A

Recursos, bibliografia i documentació complementària

Bibliografia bàsica

Química Física (8a edició); *P. Atkins y J. de Paula*; Panamericana, Buenos Aires (2008)
Química Física (1ª edició) *T. Engel, P. Reid and W. Hehre*. Pearson Education. Madrid (2006)
Físicoquímica (5a. edició); *I. N. Levine*; Mc Graw Hill, Madrid (2004)

Bibliografia complementària

Química Física. Vol I y II. *J. Delgado y J. Bertran*. Ariel. Madrid (2002)
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)
Fundamentals of Molecular Spectroscopy (4th edition); *C.N. Banwell*; Mc Graw-Hill (1994)

Altres recursos

Material que estarà disponible a Campus Extens.