

Guia docent

Identificació de l'assignatura

Assignatura / Grup	21408 - Química Física I / 1
Titulació	Grau de Química - Segon curs
Crèdits	6
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 / Edifici
Josefa Laurentina Donoso Pardo						
<i>Responsable</i>						Cal concertar cita prèvia amb el/la professor/a per a fer una tutoria
josefa.donoso@uib.es						

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 Grau de Química. El subtítol d'aquesta assignatura, *Química Quàntica i Espectroscòpia*, és la condensació dels descriptors dels seus continguts temàtics.

Quasi tota la informació sobre la composició íntima de la matèria a nivell atòmic i molecular s'obté mitjançant tècniques espectroscòpiques, és a dir tècniques on s'analitza la interacció entre la radiació electromagnètica i la matèria. Una explicació correcta dels fenòmens espectroscòpics, traduïda en termes d'estructura i propietats d'àtoms i molècules, requereix la definició d'un model atòmic i molecular adequat, la qual cosa sols se pot fer en el marc teòric de la mecànica quàntica.

Així doncs, en aquesta assignatura s'introdueixen, de manera rigorosa, els postulats de la mecànica quàntica, les seves conseqüències i la seva aplicació als models atòmics, a l'enllaç químic i als moviments atòmics i moleculars (Química Quàntica) per tal de donar una explicació plausible dels fenòmens observats en l'espectroscòpia: Microones i Infraroig, (IR), Ultraviolat-Visible (UV_Vis), fluorescència i ressonància magnètica de nuclis i electrons. Atesa l'enorme complexitat que actualment han adquirit les tècniques espectroscòpiques, en aquesta assignatura només se farà una aproximació senzilla a aquestes tècniques i se deixa per cursos més especialitzats de grau i postgrau el seu estudi avançat.

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 dona les eines per poder abordar justificadament el comportament de la matèria orgànica i inorgànica. No obstant això, n'és una assignatura d'una considerable complexitat, atès el bagatge de coneixements previs, tant de matemàtiques com de física, que requereix el desenvolupament correcte dels seus continguts. Addicionalment l'assignatura està

Guia docent

programada en una etapa molt temprana de la titulació, el que no afavoreix la seva comprensió per part de l'alumnat. Aquests condicionants exigeixen una important dedicació per part de l'alumnat

L'assignatura forma part del projecte Aula Digital 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 podriam matricular-se.

No obstant i atès els continguts que se treballen en aquest curs, per tal de treure el màxim profit, és molt recomanable tenir els coneixements requerits per aprovar les assignatures de Matemàtica I, Matemàtica II, Física I i Física II del primer curs de la titulació. D'altra banda i atès que molts dels conceptes que se treballaran en aquest curs amplien i justifiquen altres ja tractats a les assignatures de Química I i Química II del primer curs, és també molt recomanable tenir aprovades aquestes dues assignatures.

Recomanables

- Haver cursat i aprovat *Química I i 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
- Tenir un coneixement bàsic de la llengua anglesa

Competències

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.

Guia docent

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 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 y anarmònic
 - 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 rígid
 - 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

Guia docent

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

Altres mètodes de modelatge molecular en Química Quàntica

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'espins

La resonància d'espins electrònics

Metodologia docent

A aquest apartat es defineixen les activitats a realitzar.

Activitats de treball presencial (2,4 crèdits, 60 hores)

Modalitat	Nom	Tip. agr.	Descripció	Hores
Classes teòriques	Teòriques	Grup gran (G)	<p>El professor explicarà els conceptes i procediments dels continguts de l'assignatura establerts al programa. Per a la qual cosa se servirà de:</p> <ul style="list-style-type: none"> * Projeccions de documents Power Point * Pissarra per mostrar els raiplicacions de classe en documents de text a Aula Digital <p>Per aprofitar adequadament les classes expositives és necessari una "assistència activa", la qual cosa requereix seguir el raonament del professor, fer les anotacions que siguin necessàries i realitzar, seguint el professor, les demostracions pertinents.</p>	40

Guia docent

Modalitat	Nom	Tip. agr.	Descripció	Hores
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 i en alguns casos resolts, amb prou antelació per 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 (pot ser individual) on el professor resoldrà els dubtes de l'alumnat sobre els continguts del programa i sobre la resolució dels exercicis proposats.	7
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
Avaluació	Prova final d'avaluació escrita	Grup gran (G)	Prova escrita d'avaluació al final del període lectiu.	4

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 als 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 Aula digital.

Activitats de treball no presencial (3,6 crèdits, 90 hores)

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.**
- * Per aprovar l'assignatura s'ha d'aconseguir un mínim de 3,0 punts, sobre 10, en la qualificació mitjana dels exercicis de problemes
- * 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

Guia docent

L'alumnat que per motius de feina o d'altres justificats no pugui assistir a les classes presencials i no pugui seguir l'itinerari per defecte (A), s'ha de posar en contacte amb la professora durant la primera setmana de classes presencials per tal de poder habilitar el procediment (itinerari B) que permeti aprovar l'assignatura

Frau en elements d'avaluació

D'acord amb l'article 33 del Reglament acadèmic, "amb independència del procediment disciplinari que es pugui seguir contra l'estudiant infractor, la realització demostradorament fraudulenta d'algun dels elements d'avaluació inclosos en guies docents de les assignatures comportarà, a criteri del professor, una menysvaloració en la seva qualificació que pot suposar la qualificació de «suspens 0» a l'avaluació anual de l'assignatura".

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 i en alguns casos resoltos, amb prou antelació per que l'alumnat els hi pugui haver treballat i per tant tingui una participació activa en les sessions
Criteris d'avaluació	Se realitzaran 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 data per a la realització de les proves se fixarà amb una setmana d'antelació. La qualificació mitjana d'aquestes proves ha de ser igual o superior a 3,0 (sobre 10 punts totals) per poder aprovar l'assignatura. L'assistència als seminaris i tallers programats és obligatòria per poder ser avaluat positivament. Totes les absències han d'estar justificades convenientment La recuperació d'aquest element d'avaluació es realitzarà durant el període extraordinari d'avaluació el dia fixat per l'autoritat acadèmica

Percentatge de la qualificació final: 25% amb qualificació mínima 3

Tutories

Modalitat	Tutories ECTS
Tècnica	Tècniques d'observació (no recuperable)
Descripció	Tutories en grup mitjà o petit (pot ser individual) 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, inclús en tutoria individual. El lideratge en la resolució dels problemes proposats. L'actitud davant dels resultats de les proves objectives, etc. L'assistència als seminaris i tallers programats és obligatòria per poder ser avaluat positivament. Totes les absències han d'estar justificades convenientment La realització de tutories no programades, individuals o en petit grup, es tindran en compte en aquest apartat. DOS DIES ABANS de la prova parcial o de la prova final, no s'atendrà cap tutoria.

Percentatge de la qualificació final: 10%

Guia docent

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: 20%

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

Percentatge de la qualificació final: 45% amb qualificació mínima 4

Recursos, bibliografia i documentació complementària

Bibliografia bàsica

Fisicoquímica. Volum II. 5ª edició. Ira N. Levine. Ed. McGrawHill. Madrid (2004)
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)
Fundamentals of Molecular Spectroscopy (4th edition); *C.N. Banwell*; Mc Graw-Hill (1994)
Problemas de Fisicoquímica. 1ª edició. *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





Guia docent

Apuntes dels continguts, agrupats per temes, elaborats per la professora del curs i accessibles mitjançant Aula digital

