QUÍMICA FÍSICA I
GUÍA DOCENTE CURSO 2013-14

Titulación:	Grado en Química						**702G**
Asignatura:	Química física I						**427**
Materia:	Química Física						
Módulo:	Fundamental						
Carácter:	Obligatoria	**Curso:**	2	**Semestre:**	Anual		
Créditos ECTS:	12,00	**Horas presenciales:**	120,00	**Horas estimadas de trabajo autónomo:**	180,00		

Idiomas en que se imparte la asignatura:	Español
Idiomas del material de lectura o audiovisual:	Inglés, Español

DEPARTAMENTOS RESPONSABLES DE LA DOCENCIA

QUÍMICA				**R112**
Dirección:	C/ Madre de Dios, 51		**Código postal:**	26004
Localidad:	Logroño	**Provincia:**	La Rioja	
Teléfono:	941299620	**Fax:** 941299621	**Correo electrónico:**	

PROFESORADO PREVISTO

Profesor responsable de la asignatura:	Baños Arribas, Irene		
Teléfono:	941299641	**Correo electrónico:**	irene.banos@unirioja.es
Despacho:	1205	**Edificio:**	Edificio Científico Tecnológico
Horario de tutorías:	lunes, miércoles y viernes de 10 a 12h		

Profesor:	Martínez Ruiz, Rodrigo		
Teléfono:	941299672	**Correo electrónico:**	rodrigo.martinez@unirioja.es
Despacho:	1103	**Edificio:**	Edificio Científico Tecnológico
Horario de tutorías:	Primer semestre: M 16:30-18:30, X 16:30-18:30, J 9:30-11:30. Segundo semeste: M 12:00-14:00, X 16:30-18:30 , J 9:30-11:00		

Profesor:	Millán Moneo, Judith		
Teléfono:	941299640	**Correo electrónico:**	judith.millan@unirioja.es
Despacho:	1204	**Edificio:**	Edificio Científico Tecnológico
Horario de tutorías:	Primer semestre: L, M y X de 12 a 13h, J de 10 a 13h- Segundo semestre: M y X de 11 a 14h		

DESCRIPCIÓN DE LOS CONTENIDOS

- Conceptos fundamentales en Termodinámica Química.
- Equilibrios heterogéneos en sistemas de un componente.
- Disoluciones binarias no electrolíticas.
- Estudio termodinámico del equilibrio químico.
- Formalismo de la Mecánica Cuántica.
- Aplicación de la Mecánica Cuántica a sistemas sencillos de interés químico.
- Átomo de hidrógeno y átomos hidrogenoides.
- Métodos aproximados en Mecánica Cuántica.
- Átomos polielectrónicos.
- El enlace químico y la estructura molecular
- Conceptos fundamentales en Termodinámica Estadística.
- Aplicaciones de la Termodinámica Estadística a la determinación de magnitudes termodinámicas de sistemas químicos sencillos.

Se realizarán prácticas de laboratorio y aula informática que incluyen:
- Experimentación en Termodinámica Química.
- Utilización de la Química Computacional para el estudio de sistemas moleculares y biomoleculares simples.

Se aconseja conocer Química, Complementos de Química y Matemáticas, que se cursan en 1º curso del grado en Química.

Relación de asignaturas que proporcionan los conocimientos y competencias requeridos

Complementos de química
Química

CONTEXTO

En esta asignatura se estudian los principios físicos fundamentales que gobiernan las propiedades y el comportamiento de los sistemas químicos. Consta de tres bloques: Termodinámica Química, Mecánica Quántica y Termodinámica Estadística.
El objetivo del bloque de Termodinámica Química es adquirir los conocimientos teóricos y prácticos necesarios para comprender y analizar cuantitativamente el comportamiento macroscópico de la materia. De esta manera, se podrán establecer las condiciones de evolución espontánea de los procesos físicos y químicos, los intercambios de energía involucrados, las condiciones en las que se alcanza el equilibrio y los factores que lo modifican..
En el bloque correspondiente a Mecánica Cuántica se pretende que el estudiante del Grado de Química se introduzca en este disciplina mediante la presentación de los fundamentos de la Mecánica Cuántica y su aplicación a diversos sistemas de interés químico. Se da especial relevancia a las aplicaciones computacionales de la Química Cuántica, mediante la propuesta de varias sesiones de talleres computacionales.
En el bloque correspondiente a Termodinámica Estadística, se pretende que el estudiante conozca los conceptos fundamentales de la Termodinámica Estadística y su aplicación para el cálculo de diversas magnitudes termodinámicas en sistemas químicos sencillos. En última instancia se pretende que el estudiante entienda que existe la posibilidad de analizar las propiedades termodinámicas de un sistema mediante un enfoque estadístico, análisis que permite hacer las mismas predicciones que el realizado desde un punto de vista fenomenológico.
Los conocimientos adquiridos en esta asignatura deben servir, así mismo, para abordar el estudio de otras asignaturas incluidas en el Plan de Estudios, para cuyo desarrollo y comprensión es necesario conocer la estructura formal y la metodología contenidas en esta asignatura.

COMPETENCIAS

Competencias generales

Conocimiento:
- A1: Conocimiento de la terminología química, nomenclatura, convenios y unidades.
- A3: Conocimiento de las características de los diferentes estados de la materia y los modelos teóricos empleados para describirlos.
- A6: Conocimiento de los principios de la química cuántica y su aplicación a la descripción de la estructura atómica y molecular
- A13: Conocimiento de la relación entre propiedades macroscópicas y propiedades de átomos y moléculas individuales: incluyendo macromoléculas (naturales y sintéticas), polímeros, coloides y otros materiales.

Habilidades y destrezas:
- B1: Demostración del conocimiento y comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionadas con las áreas de la Química.
- B2: Resolución de problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados.
- B3: Reconocimiento y análisis de nuevos problemas y planteamiento de estrategias para solucionarlos.
- B4: Evaluación, interpretación y síntesis de datos e información química.
- B5: Valoración de los riesgos en el uso de sustancias químicas y procedimientos de laboratorio.
- B6: Manipulación, con seguridad, de las sustancias químicas y los procedimientos correctos de gestión de residuos.
- B8: Manejo de la instrumentación química estándar que se utiliza para investigaciones estructurales y separaciones.
- B9: Interpretación de los datos procedentes de observaciones y medidas en el laboratorio en términos de su significación y de las teorías que la sustentan.
- B10: Procesamiento e informatización de datos químicos.
- B11: Reconocimiento e implementación de buenas prácticas científicas de medida y experimentación.
- B12: Demostración de habilidades para presentar material científico y argumentos de forma escrita y oral a una audiencia informada.
- B13: Reconocimiento y valoración de los procesos químicos en la vida diaria.
- B14: Capacidad para relacionar la Química con otras disciplinas.

Transversales:
- C1: Capacidad de análisis y síntesis.
- C2: Capacidad de organización y planificación.
- C3: Comunicación oral y escrita.
- C4: Comprensión de textos escritos en una segunda lengua relacionados con la propia especialidad.
- C5: Uso de tecnologías de información y comunicación.
- C6: Resolución de problemas.
- C8: Trabajo en equipo.
- C10: Razonamiento crítico.
- C11: Compromiso ético.
- C12: Aprendizaje autónomo.-

Competencias específicas

RESULTADOS DEL APRENDIZAJE

- Conocer el formalismo y los métodos de la Termodinámica del Equilibrio.
- Aplicar la Termodinámica al estudio de problemas de interés químico.
- Abordar y resolver problemas numéricos relacionados con la Termodinámica Química.
- Realizar experiencias en el laboratorio aplicando los fundamentos de la Termodinámica Química a sistemas de interés para el químico.
- Conocer los postulados de la Mecánica Cuántica y sus consecuencias.
- Conocer y manejar los operadores necesarios para la aplicación de la Mecánica Cuántica.
- Aplicar la Mecánica Cuántica en la resolución de sistemas de interés para el químico desde los sistemas más elementales a sistemas más complejos.
- Utilizar herramientas informáticas para la resolución de sistemas moleculares y biomoleculares simples mediante la aplicación de la Mecánica Cuántica.
- Conocer los fundamentos de la Termodinámica Estadística.
- Aplicar la Termodinámica Estadística a sistemas de interés para el químico.
- Utilizar herramientas informáticas para la aplicación de la Termodinámica Estadística en sistemas de tamaño reducido así como para simular sistemas moleculares de dimensiones representativas de la realidad.

TEMARIO

PROGRAMA DE TEORÍA:

Tema 1.-Conceptos fundamentales en Termodinámica Química

- Conceptos fundamentales en Termodinámica
- Primer y Segundo Principio de Termodinámica
- Funciones de Gibbs y Helmhotz: Predicción del estado de equilibrio o evolución espontánea de un sistema termodinámico
- Relaciones termodinámicas para un sistema en equilibrio
- Potencial químico

Tema 2.- Equilibrios heterogéneos en sistemas de un componente

- Conceptos fundamentales: Fases. Componentes. Grados de libertad o varianza
- Regla de las fases
- Transiciones de primer orden: Ecuación de Clapeyron. Vaporización, fusión, sublimación y transiciones sólido-sólido
- Diagrama de fases. Estudio de varios sistemas representativos
- Equilibrio líquido - vapor en sustancias puras: Presión de vapor y temperatura. Ecuación de Clapeyron-Clausius y aplicaciones de la misma

Tema 3.- Disoluciones binarias no electrolíticas

- Mezclas binarias líquidas ideales. Definición y características. Estudio de la solubilidad de gases y sólidos en líquidos
- Soluciones diluidas ideales no electrolíticas. Distribución de un soluto entre dos disolventes inmiscibles. Propiedades coligativas de las disoluciones
- Soluciones reales no electrolíticas. Definición de actividad y diversas clases de coeficientes de actividad
- Equilibrio líquido-vapor en sistemas binarios. Destilación

Tema 4.- Estudio termodinámico del equilibrio químico.

- Constante de equilibrio y distintas formas de expresarla
- Efecto de las variables externas sobre la posición de equilibrio de un sistema reaccionante
- Variación de la constante de equilibrio con la temperatura

Tema 5.- Fundamentos de la Mecánica Cuántica

- Introducción histórica
- Fundamentos matemáticos
- Postulados de la Mecánica Cuántica
- Principio de indeterminación de Heisenberg

Tema 6.- Aplicación de la Mecánica Cuántica a sistemas sencillos de interés químico

- La partícula en una caja monodimensional
- La partícula en una caja bidimensional y tridimensional
- Oscilador armónico monodimensional

Tema 7.- Momento angular

- El momento angular en Mecánica Clásica
- Operadores de momento angular en Mecánica Cuántica
- El rotor rígido de dos partículas
- Armónicos esféricos

- Operadores ascendente y descendente del momento angular

Tema 8.- Átomo de hidrógeno y átomos hidrogenoides

- Ecuación de Schrödinger para un átomo o ion hidrogenoide
- Orbitales hidrogenoides
- Unidades atómicas
- Espín electrónico
- Interacción espín-órbita

Tema 9.- Métodos aproximados en Mecánica Cuántica

- Método variacional
- Método de perturbaciones

Tema 10.- Átomos polielectrónicos

- Método del campo autoconsistente de Hartree
- Principio de exclusión de Pauli
- Determinantes de Slater
- Operadores de momento angular en átomos polielectrónicos
- Adición de momentos angulares. Términos espectrales
- Efecto Zeeman

Tema 11.- El enlace químico y la estructura molecular

- Aproximación de Born-Oppenheimer
- La molécula-ion H_2^+
- La molécula de H_2
- Método de orbitales moleculares
- Metodo de enlaces de valencia
- Moléculas diatómicas homo y heteronucleares
- Moléculas poliatómicas

Tema 12.- Conceptos fundamentales en Termodinámica Estadística

- Necesidad de la Termodinámica Estadística
- Conceptos fundamentales en Termodinámica Estadística
- Ley de distribución de Boltzmann

Tema 13.- Aplicaciones de la Termodinámica Estadística a la determinación de magnitudes de sistemas químicos sencillos

- La función de partición
- Formulación estadística de las propiedades termodinámicas
- Factorización de la función de partición
- Cálculo de la función de partición traslacional
- Cálculo de la función de partición nuclear
- Cálculo de la función de partición electrónica
- Cálculo de la función de partición vibracional
- Cálculo de la función de partición rotacional

PROGRAMA DE PRÁCTICAS DE LABORATORIO Y AULA INFORMÁTICA:

- Experimentación en Termodinámica Química
- Utilización de la Química Computacional para el estudio de sistemas moleculares y biomoleculares simples

BIBLIOGRAFÍA

Tipo:	Título
Básica	Fisicoquímica Absys Biba
Básica	Química física Absys Biba
Complementaria	Química Física Absys Biba
Complementaria	Termodinámica Química Absys Biba
Recursos en Internet	

METODOLOGÍA

Modalidades organizativas

Clases teóricas
Seminarios y talleres
Clases prácticas
Tutorías
Estudio y trabajo en grupo
Estudio y trabajo autónomo individual

Métodos de enseñanza

Método expositivo - Lección magistral
Estudio de casos
Resolución de ejercicios y problemas

ORGANIZACIÓN

Actividades presenciales	Tamaño de grupo	Horas
Clases prácticas de aula	Reducido	32,00
Clases prácticas de aula informática	Informática	10,00
Clases prácticas de laboratorio	Laboratorio	10,00
Clases teóricas	Grande	68,00
Total de horas presenciales		120,00

Trabajo autónomo del estudiante	Horas
Estudio autónomo individual o en grupo	85,00
Preparación de las prácticas y elaboración de cuaderno de prácticas	10,00
Preparación en grupo de trabajos, presentaciones (orales, debates, ...), actividades en biblioteca o similar	-
Resolución de ejercicios, cuestiones, trabajos de simulación u otros trabajos mediante actividades en aula informática.	5,00
Resolución individual de ejercicios, cuestiones u otros trabajos, actividades en biblioteca o similar	80,00
Total de horas de trabajo autónomo	180,00

Total de horas	300,00

EVALUACIÓN

Sistemas de evaluación	%	¿Recuperable?
Exámenes escritos	70	Sí
Realización e informes de Prácticas de Laboratorio	15	No
Realización e informes de Prácticas en aula informática	15	No
Total	100%	

Comentarios

Exámenes escritos:
Parciales y Final. Primer examen parcial al finalizar el primer semestre liberara materia si la nota es mayor o igual que 7 sobre 10 (17.5%).
Segundo examen parcial en última semana del segundo semestre, si la nota es mayor o igual que 7 sobre 10 (31.5%).
Examen Final: 1er, 2º Parcial o ambos.
Los parciales liberados se mantienen durante las dos convocatorias del curso
Para los estudiantes a tiempo parcial (reconocidos como tales por la Universidad), las actividades de evaluación no recuperable podrán ser sustituidas por otras, a especificar en cada caso. Esta posibilidad se habilitará siempre y cuando la causa que le impida la realización de la actividad de evaluación programada sea la que ha llevado al reconocimiento de la dedicación a tiempo parcial.

Criterios críticos para superar la asignatura

La realización de las prácticas de laboratorio y de aula informática es obligatoria para superar la asignatura, así como la entrega de los correspondientes informes.
En el examen final, para superar la asignatura la nota mínima de cada parcial debe superar el 4 sobre 10.