



Asignatura: QUÍMICA FÍSICA III  
Código: 19333  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Grado en Química  
Curso Académico: 2017 - 2018  
Tipo: Obligatoria  
Nº de créditos: 6 ECTS

## ASIGNATURA / COURSE TITLE

QUÍMICA FÍSICA III / PHYSICAL CHEMISTRY III

### 1.1. Código / Course number

19333

### 1.2. Materia / Content area

QUÍMICA FÍSICA / PHYSICAL CHEMISTRY

### 1.3. Tipo / Course type

Obligatoria / Compulsory subject

### 1.4. Nivel / Course level

Grado / Grade

### 1.5. Curso / Year

3º / 3<sup>rd</sup>

### 1.6. Semestre / Semester

1º / 1<sup>st</sup> (First semester)

### 1.7. Idioma / Language

Español. Se emplea también inglés en material docente. / In addition to Spanish, English is also used in teaching material.

### 1.8. Requisitos previos / Prerequisites

Es muy recomendable haber superado las asignaturas Física I y II, y Matemáticas I y II, y haber superado o estar cursando Química Física I y II. / It is very advisable to have passed the subjects: Physics I and II, and Mathematics I and II, in addition to have passed or being studying Physical Chemistry I and II.

Es conveniente cursar esta asignatura antes de Química Física IV. / It is convenient to study this subject before Physical Chemistry IV.

Los alumnos deberán disponer de un nivel de inglés que permita leer la bibliografía de



Asignatura: QUÍMICA FÍSICA III  
Código: 19333  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Grado en Química  
Curso Académico: 2017 - 2018  
Tipo: Obligatoria  
Nº de créditos: 6 ECTS

consulta. / Students must have a suitable level of English to read references in this language.

## 1.9. Requisitos mínimos de asistencia a las sesiones presenciales / Minimum attendance requirement

La asistencia a las clases teóricas y clases prácticas en aula es muy recomendable. / Attendance to lectures and practical classes in the classroom is highly advisable.  
La asistencia a las prácticas de la asignatura es obligatoria / Attendance to Laboratory practices is mandatory.

## 1.10. Datos del equipo docente / Faculty data

### **Coordinador:**

Docente(s) / Lecturer(s): José Manuel García de la Vega  
Departamento de: / Department of: Química Física Aplicada  
Facultad: / Faculty: Ciencias  
Despacho - Módulo: / Office - Module: módulo 14 - despacho 609  
Teléfono: / Phone: +34 91 497 4963  
Correo electrónico: / Email: garcia.delavega@uam.es

### **Coordinador de prácticas:**

Alfredo Aguado Gómez  
Departamento de: / Department of: Química Física Aplicada  
Facultad: / Faculty: Ciencias  
Despacho - Módulo: / Office - Module: módulo 14 - despacho 602  
Teléfono: / Phone: +34 91 497 4954  
Correo electrónico: / Email: alfredo.aguado@uam.es  
Página web: / Website: [www.uam.es/grado\\_quimica](http://www.uam.es/grado_quimica)  
Horario de atención al alumnado: / Office hours: previa cita

Enlace al profesorado del Grado en Química de la web:  
<http://www.uam.es/ss/Satellite/Ciencias/es/1242671472425/listadoCombo/Profesorado.htm>

## 1.11. Objetivos / Objectives

El principal objetivo de este curso de Química Física es que el alumno domine los conceptos básicos de la Química Cuántica, que le permitirán obtener los siguientes resultados de aprendizaje:

- Desarrollar los conceptos básicos relacionados con los diferentes campos de la Química Física y aplicarlos a la resolución de problemas.
- Interpretar fenómenos que ocurren a nivel microscópico basándose en fundamentos



Asignatura: QUÍMICA FÍSICA III  
Código: 19333  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Grado en Química  
Curso Académico: 2017 - 2018  
Tipo: Obligatoria  
Nº de créditos: 6 ECTS

de la Química Cuántica.

- Interpretar los resultados obtenidos a partir de diferentes técnicas espectroscópicas.
- Realizar prácticas de laboratorio con rigor tanto en el procedimiento operativo como en el análisis de resultados.
- Redactar informes que reflejen el trabajo realizado en el laboratorio de Química Física y permitan reproducir los experimentos llevados a cabo.
- Mostrar destreza en la interpretación de resultados obtenidos en el laboratorio.
- Hacer una revisión y un análisis crítico de la información bibliográfica.

Estos resultados de aprendizaje contribuyen a la adquisición de las siguientes competencias del título:

#### Competencias básicas

- CB1: Que los estudiantes hayan demostrado poseer y comprender conocimientos en un área de estudio que parte de la base de la educación secundaria general, y se suele encontrar a un nivel que, si bien se apoya en libros de texto avanzados, incluye también algunos aspectos que implican conocimientos procedentes de la vanguardia de su campo de estudio.
- CB2: Que los estudiantes sepan aplicar sus conocimientos a su trabajo o vocación de una forma profesional y posean las competencias que suelen demostrarse por medio de la elaboración y defensa de argumentos y la resolución de problemas dentro de su área de estudio.
- CB3: Que los estudiantes tengan la capacidad de reunir e interpretar datos relevantes (normalmente dentro de su área de estudio) para emitir juicios que incluyan una reflexión sobre temas relevantes de índole social, científica o ética.
- CB4: Que los estudiantes puedan transmitir información, ideas, problemas y soluciones a un público tanto especializado como no especializado.
- CB5: Que los estudiantes hayan desarrollado aquellas habilidades de aprendizaje necesarias para emprender estudios posteriores con un alto grado de autonomía.

#### Competencias generales

- CG1: Aplicar los principios del método científico.
- CG2: Buscar información en las fuentes bibliográficas adecuadas.
- CG4: Aplicar los principios básicos de las distintas ramas de la Química a cualquier proceso de transformación química y a la resolución de problemas cualitativos y cuantitativos.

#### Competencias transversales

- CT1: Poseer capacidad para analizar información y sintetizar conceptos.
- CT3: Demostrar autonomía y capacidad para gestionar el tiempo y la información.
- CT4: Adquirir hábitos de trabajo en equipo.

#### Competencias específicas

- CE1: Utilizar correctamente la terminología química básica: nomenclatura, convenciones y unidades.
- CE3: Utilizar los principios y procedimientos habituales en el análisis y caracterización de compuestos químicos.



Asignatura: QUÍMICA FÍSICA III  
Código: 19333  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Grado en Química  
Curso Académico: 2017 - 2018  
Tipo: Obligatoria  
Nº de créditos: 6 ECTS

- CE4: Obtener información estructural de los compuestos químicos mediante las técnicas espectroscópicas y estructurales adecuadas.
- CE5: Reconocer las características de los diferentes estados de la materia y las teorías utilizadas para describirlos.
- CE6: Utilizar los principios de la mecánica cuántica para la descripción de la estructura y propiedades de átomos y moléculas.
- CE9: Aplicar conceptos de teorías de enlace, estructura y propiedades periódicas al estudio de los elementos y compuestos químicos.
- CE16: Reconocer y analizar nuevos problemas, planteando estrategias para solucionarlos: evaluación, interpretación y síntesis de datos.
- CE17: Utilizar adecuadamente herramientas informáticas para obtener información, procesar datos y calcular propiedades de la materia.
- CE18: Manejar de forma segura productos y materiales químicos, aplicando la Normativa de Seguridad e Higiene en el Laboratorio y evaluando los riesgos asociados al uso de sustancias químicas y procedimientos de laboratorio.
- CE20: Demostrar capacidad de observación y medida de procesos químicos, mediante el registro sistemático de los mismos y presentación del informe de trabajo realizado.
- CE21: Interpretar los hechos experimentales, relacionándolos con la teoría adecuada.
- CE22: Aplicar los principios de la Física para explicar y predecir la naturaleza y propiedades de las sustancias y fenómenos químicos.
- CE23: Realizar cálculos numéricos, con el uso correcto de unidades y análisis de errores.

## 1.12. Contenidos del programa / Course contents

El programa incluye contenidos teóricos y prácticos relacionados con fundamentos de Química Cuántica, distribuidos en 4,5 ECTS teórico-prácticos (clases teóricas, clases prácticas en aula y tutorías) y 1,5 ECTS experimentales (prácticas en laboratorio).

### PROGRAMA DE TEORÍA:

- 1. Antecedentes de la Mecánica Cuántica**  
La radiación del cuerpo negro. El efecto fotoeléctrico. Dualidad onda corpúsculo, difracción de electrones. Espectros atómicos.
- 2. Introducción a la Mecánica Cuántica**  
Postulados de la Mecánica Cuántica. Ecuación de Schrödinger. Principio de incertidumbre. La función de onda y su interpretación. Partículas en cajas. Barreras de potencial, efecto túnel. Oscilador armónico. Rotor Rígido.
- 3. Átomos**  
El átomo de Hidrógeno. Átomos hidrogenoides. Orbitales y densidad electrónica. Espín electrónico. Átomos polielectrónicos, aproximación orbital. Configuraciones electrónicas (Principios de Pauli y Aufbau). Términos espectrales. Transiciones entre niveles de energía electrónica.



Asignatura: QUÍMICA FÍSICA III  
Código: 19333  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Grado en Química  
Curso Académico: 2017 - 2018  
Tipo: Obligatoria  
Nº de créditos: 6 ECTS

#### 4. Moléculas y Enlace Químico

La ecuación de Schrödinger molecular. La aproximación de Born-Oppenheimer. La ecuación de Schrödinger electrónica, orbitales moleculares. La molécula más simple: el  $H_2^+$ . Otras moléculas diatómicas. Moléculas poliatómicas, geometrías moleculares. Superficies de energía potencial. Reacciones químicas.

#### 5. Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo

Emisión y absorción de radiación. Coeficientes de Einstein. Anchura e intensidad de las líneas: Probabilidad de transición, reglas de selección.

### PROGRAMA DE PRÁCTICAS:

Se realizarán prácticas en laboratorios especializados sobre los siguientes temas:

- Resolución de sistemas modelo: pozos de potencial, barreras y efecto túnel.
- Orbitales atómicos.
- Espectros atómicos.
- Curvas de energía potencial para moléculas diatómicas.
- Cálculo de superficies de energía potencial.
- Teoría de orbitales moleculares en moléculas poliatómicas.

## 1.13. Referencias de consulta / Course bibliography

### **Bibliografía de consulta básica (teoría):**

- LEVINE, I.N. *Química Cuántica*. Pearson Educación, 5ª Ed., 2001.
- SILBEY, R.J.; ALBERTY, R.A.; BAWENDI, M.G. *Physical Chemistry*. John Wiley & Sons, Inc., 2005.
- ATKINS, P.; DE PAULA, J. *Physical Chemistry*. Oxford University Press. 9ª Ed., 2010.
- BERTRÁN RUSCA, J.; NÚÑEZ DELGADO, J. *Química Física*. Vol I. y II. Editorial Ariel, 2002.

### **Bibliografía de consulta básica (problemas y prácticas):**

- BERTRÁN, J.; NÚÑEZ, J. *Problemas de Química Física*. Delta Publicaciones, 2007.
- HALPERN, A.M. *Experimental Physical Chemistry*, Prentice Hall, 1997.
- LEVINE, I.N. *Problemas de Fisicoquímica*, Mc GrawHill, 2005.
- CADY, M.P.; TRAPP, C.A. *A Mathcad Primer for Physical Chemistry*. Oxford University Press, 1999.



Asignatura: QUÍMICA FÍSICA III  
Código: 19333  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Grado en Química  
Curso Académico: 2017 - 2018  
Tipo: Obligatoria  
Nº de créditos: 6 ECTS

## 2. Métodos docentes / Teaching methodology

### Actividades Formativas:

PRESENCIALES: clases teóricas, clases prácticas en aula, prácticas de laboratorio, tutorías y realización de exámenes.

NO PRESENCIALES: elaboración de memorias, estudio y trabajo autónomo individual.

### Metodologías Docentes:

- **CLASES TEÓRICAS:**  
Presentaciones orales por parte del profesor de los contenidos teóricos fundamentales de cada tema, intercalados con preguntas y ejercicios. En estas sesiones se utilizará tiza y pizarra tradicional, así como material audiovisual (presentaciones, transparencias, etc.) que se encontrará disponible en la página de docencia en red (<https://moodle.uam.es>). Con estas clases se fomenta la adquisición de las competencias básicas CB1-CB5, generales CG1, CG2 y CG4, y la transversal CT1 del título, así como las específicas de la asignatura CE1, CE3, CE4, CE5, CE6, CE9, CE16, CE21 y CE22 descritas en el apartado 1.11.
- **PRÁCTICAS EN AULA:**  
Resolución, en grupos reducidos (de hasta 20 estudiantes) y con participación directa del estudiante, de problemas numéricos y casos prácticos propuestos por el profesor, así como de aquellos problemas y cuestiones que los propios alumnos planteen. Con estas clases se fomenta la adquisición de las competencias básicas CB1-CB5, generales CG1, CG2 y CG4, y transversales CT1 y CT4 del título, así como las específicas de la asignatura CE1, CE3, CE4, CE5, CE6, CE9, CE16, CE21 y CE22 descritas en el apartado 1.11.
- **PRÁCTICAS DE LABORATORIO:**  
El alumno realizará de forma supervisada prácticas en laboratorios especializados en los que pondrá en práctica los conocimientos teóricos adquiridos. Con estas prácticas se fomenta la adquisición de las competencias básicas CB1-CB5, generales CG1, CG2 y CG4, y transversales CT1, CT3 y CT4 del título, así como las específicas de la asignatura CE1, CE3, CE4, CE5, CE6, CE9, CE16, CE17, CE18, CE20, CE21, CE22 y CE23 descritas en el apartado 1.11.
- **TUTORÍAS:**  
Además de las tutorías individuales, los profesores podrán ofertar tutorías en grupo, previo acuerdo y fuera del horario de clases presenciales. El objetivo de estas tutorías es que los alumnos adquieran las competencias CB1-CB5, CG1, CG2, CG4, CT1, CT3, CT4 del título, así como las específicas de la asignatura CE1, CE3, CE4, CE5, CE6, CE9, CE16, CE17, CE18, CE20, CE21, CE22 y CE23 descritas en el apartado 1.11.



Asignatura: QUÍMICA FÍSICA III  
Código: 19333  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Grado en Química  
Curso Académico: 2017 - 2018  
Tipo: Obligatoria  
Nº de créditos: 6 ECTS

### 3. Tiempo de trabajo del estudiante / Student workload

		nº de horas	porcentaje
Presencial	Clases teóricas	30	50%
	Clases prácticas en aula	15	
	Prácticas de laboratorio	25	
	Tutorías	2	
	Realización de exámenes	3	
No presencial	Estudio y trabajo autónomo individual	75	50%
<b>Total de horas de trabajo: 25 horas x 6 ECTS</b>		<b>150</b>	<b>100%</b>

### 4. Métodos de evaluación y porcentaje en la calificación final / Evaluation procedures and weight of components in the final grade

Los resultados del aprendizaje y la formación adquirida por el estudiante serán evaluados a lo largo de todo el curso, intentando que el estudiante avance de forma regular y constante en la asimilación de los contenidos de la asignatura. La contribución a la calificación final será la siguiente.

Sistema de evaluación		Ponderación convocatoria ordinaria	Ponderación convocatoria extraordinaria
Pruebas objetivas de evaluación escritas	Control intermedio	10%	0%
	Examen final	55%	70%
Prácticas de Laboratorio		20%	20%
Participación en las Prácticas en Aula		15%	10%

Con el examen final, el control intermedio y el trabajo de prácticas en aula se evalúa la capacidad de desarrollar conceptos básicos de Química Cuántica y aplicarlos a la resolución de problemas, en particular interpretar resultados obtenidos a partir de diferentes técnicas espectroscópicas y fenómenos que ocurren a nivel microscópico. Con las prácticas de laboratorio se evalúa la capacidad de realizar con rigor prácticas relacionadas con la Química Cuántica en laboratorios especializados, interpretar los resultados obtenidos, buscar y analizar bibliografía relacionada y, finalmente, redactar informes que reflejen el trabajo realizado en el laboratorio y las conclusiones alcanzadas.



Asignatura: QUÍMICA FÍSICA III  
Código: 19333  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Grado en Química  
Curso Académico: 2017 - 2018  
Tipo: Obligatoria  
Nº de créditos: 6 ECTS

## CONVOCATORIA ORDINARIA

- Evaluación continua mediante controles periódicos.  
Se realizará una prueba corta, de carácter individual.
- Examen Final  
En la convocatoria ordinaria se realizará un examen al finalizar el semestre. Para poder tener en cuenta las demás contribuciones a la calificación final, será necesario obtener una calificación mínima de 3.5 puntos sobre 10.
- Participación en las Prácticas en Aula:  
Consistirá en la realización de trabajos, memorias y/o ejercicios realizados bajo la tutoría del profesor.
- Evaluación de las Prácticas de Laboratorio  
Las prácticas tienen carácter obligatorio.  
La calificación de las prácticas de laboratorio se hará de la siguiente forma: Un 40% de la calificación máxima se derivará de la realización correcta de todas ellas, teniendo en cuenta el trabajo realizado en el laboratorio y los informes de prácticas presentados. El restante 60% se obtendrá de un examen de prácticas. La calificación final de las prácticas se incorporará a la calificación final de la asignatura con una proporción del 20% de la calificación total, siendo necesario para superar la asignatura obtener una calificación mínima de 4 sobre 10.  
Aquellos estudiantes que hubieran realizado las prácticas el curso anterior y tengan una calificación igual o superior a 5 sobre 10, tendrán la opción de no repetirlas si así lo solicitan, y mantendrán la calificación obtenida el curso anterior.

*Nota:* El estudiante que haya participado en menos de un 20% de las actividades de evaluación, será calificado en la convocatoria ordinaria como “No evaluado”.

## CONVOCATORIA EXTRAORDINARIA

- Examen Final  
Se realizará un examen final correspondiente a los contenidos teórico-prácticos de la asignatura. Para poder tener en cuenta las demás contribuciones a la calificación final, será necesario obtener una nota mínima de 3.5 sobre 10 en este examen.
- Participación en las Prácticas en Aula:  
La calificación será la obtenida en la convocatoria ordinaria.
- Prácticas de Laboratorio  
La calificación será la obtenida en la convocatoria ordinaria, salvo aquellos alumnos que las hubieran suspendido en esa convocatoria, que deberán realizar un examen de prácticas además del examen final escrito, siendo necesario para superar la asignatura obtener una calificación mínima de 4 sobre 10. La distribución de las calificaciones será la de la convocatoria ordinaria, un 40% de la calificación se deriva de la realización correcta de todas ellas y el restante 60% se obtendrá del examen de prácticas.





Asignatura: QUÍMICA FÍSICA III  
Código: 19333  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Grado en Química  
Curso Académico: 2017 - 2018  
Tipo: Obligatoria  
Nº de créditos: 6 ECTS

## 5. Cronograma\* / Course calendar

Contenido <i>Contents</i>	Horas presenciales <i>Contact hours</i>
Tema 1. Antecedentes de la Mecánica Cuántica	5
Tema 2. Introducción a la Mecánica Cuántica	15
Tema 3. Átomos	10
Tema 4. Moléculas y Enlace Químico	10
Tema 5. Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo	5
9 ó 10 sesiones de prácticas de laboratorio	25

\*Este cronograma tiene carácter orientativo.

Ver horario del curso y calendario de evaluación en: [http://www.uam.es/ss/Sate-llite/Ciencias/es/1242655569378/listadoCombo/Horarios\\_y\\_evaluaciones.htm](http://www.uam.es/ss/Sate-llite/Ciencias/es/1242655569378/listadoCombo/Horarios_y_evaluaciones.htm)

La entrega de ejercicios, realización de test, etc. se comunicará a través de la página Moodle de la asignatura.