

# QUÍMICA FÍSICA I: ESTRUCTURA ATÓMICA Y MOLECULAR

Curso 2013/2014

(Código: 61032066)

## 1. PRESENTACIÓN DE LA ASIGNATURA

Nombre de la asignatura: "Química Física I: Estructura atómica y molecular"

Código: 61032066

Curso: 2º

Semestre: 1º

Carácter: Obligatorio

Número de créditos ECTS: 5, que equivalen a 125 horas.

Módulo: Materias fundamentales (129 ECTS)

Materia: Química Física (33 ECTS)

Esta es la primera asignatura integrante de la materia de Química Física que se imparte en el Plan de estudios del Grado en Química. La Química Física tiene por objeto aplicar la Física a la Química, con la intención de que sea útil a ésta. Dentro de esta materia, la asignatura "Química Física I" aporta los criterios estructurales que, junto con los criterios termodinámicos y cinéticos propios de otras asignaturas afines, proporcionan la base teórica necesaria para interpretar y predecir los hechos experimentales de la Química

## 2. CONTEXTUALIZACIÓN EN EL PLAN DE ESTUDIOS

El título de Graduado en Química tiene como finalidad la obtención de una formación general en esta disciplina, orientada a su preparación para el ejercicio de actividades de carácter profesional.

De entre los objetivos generales que persigue el Grado en Química que están reflejados en la memoria aprobada por la ANECA, esta asignatura contribuye a la consecución de los siguientes:

Inculcar un interés por el aprendizaje de la Química, que permita valorar sus aplicaciones en diferentes contextos e involucrar a los estudiantes en la experiencia intelectualmente estimulante y satisfactoria de aprender y estudiar.

Proporcionar una base sólida y equilibrada de conocimientos químicos y habilidades prácticas.

Desarrollar la habilidad para aplicar los conocimientos químicos, teóricos y prácticos, a la solución de problemas en Química.

Proporcionar una base de conocimientos y habilidades con las que los estudiantes puedan continuar sus estudios en áreas especializadas de Química o áreas multidisciplinares.

Esta asignatura contribuye al desarrollo de una parte de las competencias genéricas y específicas reflejadas en la memoria aprobada por la ANECA para la obtención del título de Graduada o Graduado en Química, que son las que se detallan a continuación:

Competencias genéricas

- Iniciativa y motivación
- Planificación y organización
- Manejo adecuado del tiempo
- Análisis y Síntesis



- Aplicación de los conocimientos a la práctica
- Razonamiento crítico
- Toma de decisiones
- Seguimiento, monitorización y evaluación del trabajo propio o de otros
- Motivación por la calidad
- Comunicación y expresión escrita
- Comunicación y expresión matemática, científica y tecnológica
- Competencia en el uso de las TIC
- Competencia en la búsqueda de información relevante
- Competencia en la gestión y organización de la información
- Compromiso ético (por ejemplo en la realización de trabajos sin plagios, etc.)

#### Competencias específicas relativas a conocimientos

- Conocimiento y comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionadas con las áreas de la Química
- Conocimiento de la terminología química: nomenclatura, términos, convenios y unidades.
- Conocimiento de los principios fisicoquímicos fundamentales que rigen la Química y sus relaciones entre las áreas de la Química.
- Una base de conocimientos que posibilite continuar los estudios en áreas especializadas de Química o áreas multidisciplinares, y en múltiples dominios de aplicación, tanto tradicionales como nuevos.
- Conocimiento y comprensión de los conceptos matemáticos y físicos necesarios para el estudio de la Química

#### Competencias específicas relativas a habilidades

- Capacidad para aplicar los conocimientos químicos, teóricos y prácticos, a la resolución de problemas cualitativos y cuantitativos en los ámbitos de la química
- Habilidad para evaluar, interpretar y sintetizar datos e información química
- Capacidad para relacionar la Química con otras disciplinas
- Manejo de los modelos abstractos aplicables al estudio de la Química
- Capacidad de aplicar los conocimientos de Matemáticas y Física a la resolución de problemas en el ámbito de la Química

### 3.REQUISITOS PREVIOS REQUERIDOS PARA CURSAR LA ASIGNATURA

#### Conocimientos teóricos

Para abordar el estudio de esta asignatura se recomienda haber superado la materia de Química que se estudia previamente. Además, por formar parte de la materia de Química Física, es necesario tener una buena base de Física y Matemáticas, por lo que se recomienda también haber cursado y aprobado estas materias.

En especial, se requieren nociones de álgebra matricial y de cálculo diferencial e integral, así como algunos conceptos esenciales de mecánica, ondas y electromagnetismo, todo lo cual se ha podido adquirir en las asignaturas de cursos anteriores, sin que a este nivel sean necesarios desarrollos más elevados.



## Habilidades y destrezas de carácter práctico

Algunas habilidades de tipo instrumental que pueden facilitar el estudio de la asignatura son las siguientes:

- Lectura comprensiva de textos científicos que incluyan desarrollos matemáticos y razonamientos físicos.
- Manejo de calculadora científica para realizar los cálculos numéricos requeridos en los ejercicios.
- Cambios de unidades.
- Búsqueda de información puntual en tablas de datos fisicoquímicos.
- Realización de resúmenes y fichas conceptuales o bibliográficas.
- Manejo de paquetes informáticos del tipo de procesador de textos (Word o similar) y de cálculos estadísticos especialmente de regresión lineal (Excel, Origin,...). Opcionalmente, de dibujo de moléculas (ChemDraw o similar), y si es posible de tratamiento cuántico de moléculas (Spartan, Gaussian,...).
- Conocimientos básicos de inglés, que posibiliten en caso necesario la consulta de fuentes de conocimiento en este idioma que haya disponibles en libros, revistas, Internet,...

Otras destrezas específicas de tipo matemático son:

- Utilización de equivalencias entre expresiones trigonométricas.
- Cálculo de derivadas sencillas
- Cálculo de integrales sencillas
- Cambios de sistemas de coordenadas: por ejemplo de cartesianas a polares.

## Materiales de lectura y formación complementaria

En caso de que se considere necesario actualizar conocimientos básicos de Física o Matemáticas, se puede recomendar la consulta de algún texto de estas materias tales como los de Tipler o Steiner, o bien otros de que se disponga. La Universidad pone a su disposición unos Cursos Cero de Física y Matemáticas que le pueden ayudar para obtener esta formación básica. También puede ser útil el manejo de un buen diccionario científico tal como el Diccionario de Física de Oxford

## 4.RESULTADOS DE APRENDIZAJE

Los resultados de aprendizaje se pueden resumir en dos grandes puntos:

- Conocer los principios de la Mecánica Cuántica y su aplicación a la descripción de la estructura y propiedades de los átomos y las moléculas.
- Reunir e interpretar datos relevantes utilizando la información bibliográfica y técnica para emitir juicios o dictámenes que permitan explicar de manera comprensible fenómenos y procesos relacionados con la Química.

Más en concreto a través del estudio de esta asignatura debería lograrse:

- Comprender las posibilidades que ofrecen los diversos métodos físicos, su grado de validez y aproximación, y cuándo es apropiado utilizarlos y hasta qué nivel.
- Reconocer que la formación teórica, sobre todo en las áreas más abstractas, como son las de la Química Cuántica y sus aplicaciones directas, no debe enmascarar ni subestimar el sentido experimental de la Química Física.
- Comprender el valor complementario de los métodos físicos, tanto teóricos como experimentales, y cómo es preciso coordinarlos para profundizar más en la interpretación de los entes y hechos de la Química.
- Adquirir herramientas para tratar de forma cuantitativa la teoría en Química Física con la realización de ejercicios numéricos que, a ser posible, se refieran a realidades de la Química.



## 5. CONTENIDOS DE LA ASIGNATURA

La asignatura "Química Física I" está dedicada a un estudio básico de la estructura atómico – molecular. Sus contenidos temáticos son los siguientes:

Fundamentos de mecánica cuántica. Introducción al estudio de sistemas sencillos. Átomos. Moléculas diatómicas. Elementos y grupos de simetría. Moléculas poliatómicas. Propiedades eléctricas y magnéticas.

El programa en el que se desarrollan estos contenidos está organizado en 3 Unidades Didácticas formadas por 4 Temas cada una, tal como se describe a continuación:

1. Introducción a la Mecánica cuántica y al estudio de la estructura atómica.

Tema 1. Introducción a la mecánica cuántica

Tema 2. Estudio de sistemas sencillos I: Caja de potencial. Efecto túnel.

Tema 3. Estudio de sistemas sencillos II: Oscilador armónico. Rotor rígido

Tema 4. Átomo de hidrógeno e hidrogenoides

Se exponen los fundamentos básicos de la Mecánica cuántica, que es el método teórico idóneo para profundizar en el estudio de los sistemas atómicos y moleculares, y se analizan las reglas de su formalismo. Estos conceptos se aplican a modelos sencillos que son adecuados para el tratamiento microscópico de los sistemas químicos. A continuación se aborda el estudio de la unidad química elemental, el átomo, comenzando por el átomo de hidrógeno, que dentro de su sencillez es la base del tratamiento posterior de todos los demás átomos y moléculas.

2. Átomos de varios electrones. Introducción a la teoría del enlace químico.

Tema 5. Átomos dielectrónicos. Métodos aproximados.

Tema 6. Átomos polieletrónicos. Configuración electrónica y propiedades periódicas

Tema 7. Bases de la teoría del enlace químico. Método de enlace de valencia

Tema 8. Método de orbitales moleculares: Molécula de hidrógeno

Los resultados del tratamiento del átomo de hidrógeno se aplican a otros sistemas siguiendo un orden de complejidad creciente. Se estudian los átomos dielectrónicos y polieletrónicos, con el objetivo de relacionar su estructura con sus propiedades químicas. A continuación se aborda el estudio de la formación de las moléculas y de las fuerzas de enlace, comenzando por las moléculas diatómicas y concretamente por la más sencilla que es la de hidrógeno. Se justifica la conveniencia de estudiar por separado la estructura electrónica, que es relevante en la aproximación electrónica a la teoría del enlace químico, y la estructura formada por los núcleos, que da lugar a la conformación y a los movimientos de rotación y vibración de las moléculas. El estudio del enlace químico se realiza atendiendo a su estabilidad y direccionalidad, mediante la utilización de los métodos complementarios de enlace de valencia y de orbitales moleculares.

3. Moléculas diatómicas y poliatómicas. Propiedades eléctricas y magnéticas.

Tema 9. Moléculas diatómicas

Tema 10. Simetría molecular

Tema 11. Moléculas poliatómicas

Tema 12. Propiedades eléctricas y magnéticas de las moléculas

De modo análogo a como se ha procedido para los átomos, la metodología utilizada para la molécula de hidrógeno se extiende a otras moléculas diatómicas, tanto homonucleares como heteronucleares. En estas últimas se discute la emergencia de la polaridad y su relevancia química. La discusión de la simetría de las moléculas poliatómicas precede al estudio de su estructura electrónica, considerando por separado aquellas moléculas en las que prevalecen los enlaces localizados, y otras moléculas tales como las conjugadas y aromáticas, cuyas propiedades químicas están condicionadas por la existencia de enlaces no localizados. Finalmente se analiza la influencia de la estructura electrónica en las propiedades eléctricas y magnéticas de las moléculas, que son esenciales para explicar el comportamiento espectroscópico y las interacciones mutuas entre las moléculas que serán estudiados en otras asignaturas posteriores.

## 6. EQUIPO DOCENTE

- [FERNANDO PERAL FERNANDEZ](#)



## 7.METODOLOGÍA Y ACTIVIDADES DE APRENDIZAJE

La metodología a utilizar es la propia de la enseñanza a distancia con los recursos de Internet. Se desarrollará en el curso virtual dispuesto al efecto en la plataforma "aLF" de la UNED. A fin de alcanzar los resultados de aprendizaje de un modo eficiente, la asignatura se ha organizado siguiendo la secuencia de actividades que se describen a continuación.

Estudio de los contenidos teóricos del programa.

Los Temas en que se desarrolla el programa de la asignatura han sido preparados por el equipo docente teniendo en cuenta las características peculiares del estudio a distancia, y estarán a disposición de los estudiantes en la plataforma virtual al comienzo del curso. Incluyen los siguientes elementos:

1. Resumen de conocimientos básicos previos al estudio de cada uno de los Temas.
2. Objetivos específicos de cada Tema.
3. Desarrollo de los contenidos del Tema, dedicando especial atención a las explicaciones de los conceptos básicos de cada uno de los apartados que los componen.
4. Referencias bibliográficas.
5. Actividades, constituidas por cuestiones y problemas de los que se facilitan las soluciones completas.

Se recomienda que los Temas se lean inicialmente de modo que se obtenga una perspectiva de conjunto, identificando los conceptos esenciales, y después se estudien con detalle, recurriendo en caso necesario a la consulta de los textos indicados en la bibliografía.

Realización de actividades de aprendizaje.

Después de adquirir un conocimiento suficientemente completo de cada Tema, es muy conveniente realizar una auto-evaluación mediante los ejercicios y propuestas prácticas incluidos al final de los Temas, de los que pueden consultarse las soluciones, que están incluidas en dichos Temas.

Pruebas de evaluación continua (PEC).

Está prevista la realización de dos Pruebas de evaluación continua, tal como se describe en el apartado de Evaluación.

Prueba presencial.

La evaluación final se concreta mediante una Prueba presencial que tendrá lugar en los términos descritos en el apartado de Evaluación.

En las asignaturas de las materias teóricas integradas en el plan formativo del Grado en Química, se han considerado con carácter general los siguientes porcentajes para la estimación de las horas dedicadas a las distintas actividades formativas, que pueden servir de orientación para los estudiantes:

Preparación y estudio del contenido teórico: 25 %

Desarrollo de actividades prácticas: 15 %

Trabajo autónomo: 60 %

## 8.EVALUACIÓN

La asignatura cuenta con una serie de actividades mediante las que se llevará a cabo la evaluación final:

Pruebas de Evaluación Continua (PEC)

La asignatura contará con dos Pruebas de Evaluación Continua que el estudiante intentará resolver, con el fin de evaluar los conocimientos adquiridos. Las PEC estarán disponibles unos días antes de su fecha de entrega. Deben ser entregadas a través de la plataforma virtual mediante la herramienta "Tareas" y en formato.doc con el fin de facilitar la corrección. Tenga en cuenta que debe respetarse la fecha y hora de entrega límite ya que el sistema informático no aceptará que se envíen



con posterioridad. El tutor devolverá las PEC corregidas para ayudar al estudiante en el estudio de la asignatura.

#### Pruebas Presenciales

Habrà una Prueba Presencial en la convocatoria de febrero y otra convocatoria extraordinaria en septiembre. El examen constará de un solo ejercicio a desarrollar en dos horas y que se celebrará a la hora y días señalados en el calendario de Pruebas Presenciales elaborado por la UNED.

El examen presencial consta de dos partes. La primera se compone de diez cuestiones con formato tipo test de respuesta múltiple, aunque no es una prueba objetiva ya que deberá justificar la/s respuesta/s que se consideren correctas. La segunda parte se compone de tres problemas entre los que se deberá elegir dos. Ambas partes contribuyen con el 50% a la calificación final del examen presencial. Para aprobar el examen será requisito imprescindible obtener una calificación mínima de tres en cada una de las partes (teoría y problemas)

#### Calificación final:

En la convocatoria ordinaria de febrero cada una de las PEC contribuye con un 5% a la calificación final, y el examen presencial supone el restante 90%. De acuerdo con esto, la calificación final se obtiene mediante la expresión:

$$\text{Calificación} = 0,05 \text{ PEC1} + 0,05 \text{ PEC2} + 0,90 \text{ Examen}$$

En la convocatoria extraordinaria de septiembre, la calificación final será la obtenida en el examen presencial.

## 9. BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

ISBN(13): 9789500612487

Título: QUÍMICA FÍSICA (8ª edición)

Autor/es: Atkins, Peter; De Paula, Julio ;

Editorial: Editorial Médica Panamericana, Buenos Aires, 2008

Buscarlo en Editorial UNED

Buscarlo en librería virtual UNED

Buscarlo en bibliotecas UNED

Buscarlo en la Biblioteca de Educación

#### Comentarios y anexos:

Este texto está dividido en tres partes: Equilibrio, Estructura y Cambio. La parte que tiene relación con la asignatura es la de Estructura, de la que los capítulos 8-12 y parte del 18 se adaptan al programa.

Los contenidos son bastante completos y se consideran de referencia en todo el mundo. Incluyen explicaciones y desarrollos de gran claridad, figuras en color, tablas, ejemplos resueltos, listados de conceptos clave, lecturas recomendadas, y una selección de preguntas cortas, ejercicios y problemas al final de cada capítulo. También dispone de contenidos accesibles en Internet, tales como presentaciones, datos y gráficos complementarios, y enlaces a otros sitios de interés.

La función que cumple este texto en el estudio de la asignatura es la de aportar materiales detallados que completen la preparación de los Temas del programa.

## 10. BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

ISBN(13): 9788436213508

Título: QUÍMICA CUÁNTICA. LA QUÍMICA CUÁNTICA EN 100 PROBLEMAS (1ª)

Autor/es: Bailey Chapman, Lorna Elizabeth ; Troitiño Núñez, Mª Dolores ;

Editorial: UNED



Buscarlo en librería virtual UNED

Buscarlo en bibliotecas UNED

Buscarlo en la Biblioteca de Educación

Buscarlo en Catálogo del Patrimonio Bibliográfico

ISBN(13): 9788448137878

Título: QUÍMICA FÍSICA. VOLUMEN II (5ª Edición)

Autor/es: Levine, Ira N. ;

Editorial: Ariel Ciencia

Buscarlo en librería virtual UNED

Buscarlo en bibliotecas UNED

Buscarlo en la Biblioteca de Educación

Buscarlo en Catálogo del Patrimonio Bibliográfico

ISBN(13): 9788448198336

Título: PROBLEMAS DE FISICOQUÍMICA

Autor/es: Levine, Ira N. ;

Editorial: : MCGRAW-HILL INTERAMERICANA DE ESPAÑA

Buscarlo en librería virtual UNED

Buscarlo en bibliotecas UNED

Buscarlo en la Biblioteca de Educación

Buscarlo en Catálogo del Patrimonio Bibliográfico

ISBN(13): 9788478290772

Título: QUÍMICA FÍSICA (2006)

Autor/es: Engel, T. ; Hehre, W. ; Reid, P. ;

Editorial: PEARSON ADDISON-WESLEY

Buscarlo en librería virtual UNED

Buscarlo en bibliotecas UNED

Buscarlo en la Biblioteca de Educación

Buscarlo en Catálogo del Patrimonio Bibliográfico

ISBN(13): 9788496477483

Título: PROBLEMAS DE QUÍMICA FÍSICA (2006)

Autor/es: Bertrán Rusca J. ; Núñez Delgado J. ;

Editorial: Delta Publicaciones Universitarias



Buscarlo en librería virtual UNED

Buscarlo en bibliotecas UNED

Buscarlo en la Biblioteca de Educación

Buscarlo en Catálogo del Patrimonio Bibliográfico

## Comentarios y anexos:

Se ha seleccionado en la bibliografía complementaria una representación de los textos más modernos publicados en español y que pueden enriquecer el estudio de la asignatura. Del mismo modo, en los libros de problemas encontrará algunos ejercicios de similares características a los que se proponen en este curso. Algunos de los libros se encuentran disponibles parcialmente en la red a través de google books.

La consulta de estas obras no es obligatoria, pero sí se recomienda para adquirir una formación más completa y profundizar en el estudio de la asignatura.

## 11. RECURSOS DE APOYO

Los principales medios materiales de apoyo que podrán utilizar los estudiantes de esta asignatura son los siguientes:

### Curso virtual

Se desarrollará en la plataforma "aLF" habilitada al efecto en la web de la UNED. Albergará materiales necesarios para la preparación de la asignatura, principalmente los Temas que componen el programa, así como herramientas de comunicación adecuadas para crear foros de discusión de cuestiones de la asignatura y mantenerlos activos.

### Biblioteca

Tanto la Biblioteca Central como las Bibliotecas de los Centros Asociados de la UNED contienen una buena selección de obras adecuadas para el estudio de la Química Física en general y de esta asignatura en particular, cuya consulta se recomienda a todos los estudiantes.

### Enlaces a Internet

En el curso virtual se incluirán enlaces de Internet que se consideren de interés para el estudio de la asignatura, dedicando especial atención a aquellos que contengan galerías de imágenes y animaciones relativas a modelos atómicos y moleculares, o bien informaciones de tipo institucional o histórico que resulten adecuadas para la adquisición de las competencias previstas.

### Medios audiovisuales

Dentro del curso virtual encontrará programas de radio relacionados con la asignatura. También le recomendamos que vea el video "15 minutos en la vida del electrón" al que puede acceder a través del siguiente enlace:

[http://www.uned.es/cemav/15m\\_electron.htm](http://www.uned.es/cemav/15m_electron.htm)

Otros medios telemáticos disponibles en la UNED, tales como webconferencia o videoconferencia, adicionales a las Tutorías Intercampus que se programen en el curso virtual, podrán ser utilizados si existe suficiente demanda por parte de los estudiantes, en cuyo caso se coordinarán con los Centros Asociados interesados.

## 12. TUTORIZACIÓN

En esta asignatura existen dos tipos de tutorías dirigidas a resolver las dudas de los estudiantes.

### Tutorías presenciales

Tienen lugar en cada Centro Asociado, son impartidas por los Profesores Tutores y su organización depende de las disponibilidades de cada Centro. Consulte en su Centro Asociado para obtener esta información.



#### Tutorías virtuales

Son impartidas de forma telemática por los Tutores Intercampus a todos los estudiantes a través del curso virtual. Se puede interaccionar con los Tutores y con el Equipo Docente en los distintos foros de que dispondrá el curso virtual. La figura del Tutor es fundamental, por lo que si no tiene Tutor asignado le rogamos que lo exponga en su Centro Asociado, pues son ellos los encargados de asignarle uno.

Al inicio del curso se explicará la función de cada uno de estos foros, a través de la plataforma virtual, a los alumnos matriculados en la asignatura.

#### Horario de atención del Equipo Docente

La forma de contactar con el Equipo Docente será preferentemente mediante el curso virtual. Puede utilizar los foros para consultas públicas y el correo electrónico para consultas de tipo privado.

Los profesores se encuentran en la Sede Central, cuya dirección es:

Departamento de Ciencias y Técnicas Físicoquímicas  
Facultad de Ciencias de la UNED  
Paseo Senda del Rey, 9  
28040 Madrid

Los profesores tienen el siguiente horario de guardia para la asignatura, excepto vacaciones y semanas de celebración de Pruebas Presenciales:

Fernando Peral Fernández

Despacho 307

Tel.: 91 398 73 83

Horario de Guardia: Jueves de 15 a 19 horas

Correo electrónico: [fperal@ccia.uned.es](mailto:fperal@ccia.uned.es)

Carmen Sánchez Renamayor

Despacho 341

Tel.: 91 398 73 86

Horario de guardia: Miércoles de 16 a 20 horas

Correo electrónico: [csanchez@ccia.uned.es](mailto:csanchez@ccia.uned.es)

