

17-18

GRADO EN QUÍMICA
SEGUNDO CURSO

GUÍA DE ESTUDIO PÚBLICA



QUÍMICA FÍSICA I: ESTRUCTURA ATÓMICA Y MOLECULAR

CÓDIGO 61032066

UNED

17-18**QUÍMICA FÍSICA I: ESTRUCTURA ATÓMICA
Y MOLECULAR****CÓDIGO 61032066**

ÍNDICE

PRESENTACIÓN Y CONTEXTUALIZACIÓN
REQUISITOS Y/O RECOMENDACIONES PARA CURSAR LA
ASIGNATURA
EQUIPO DOCENTE
HORARIO DE ATENCIÓN AL ESTUDIANTE
TUTORIZACIÓN EN CENTROS ASOCIADOS
COMPETENCIAS QUE ADQUIERE EL ESTUDIANTE
RESULTADOS DE APRENDIZAJE
CONTENIDOS
METODOLOGÍA
SISTEMA DE EVALUACIÓN
BIBLIOGRAFÍA BÁSICA
BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA
RECURSOS DE APOYO Y WEBGRAFÍA

Nombre de la asignatura	QUÍMICA FÍSICA I: ESTRUCTURA ATÓMICA Y MOLECULAR
Código	61032066
Curso académico	2017/2018
Departamento	CIENCIAS Y TÉCNICAS FISICOQUÍMICAS
Título en que se imparte	GRADO EN QUÍMICA
Curso	SEGUNDO CURSO
Tipo	OBLIGATORIAS
Nº ETCS	5
Horas	125.0
Periodo	SEMESTRE 1
Idiomas en que se imparte	CASTELLANO

PRESENTACIÓN Y CONTEXTUALIZACIÓN

Esta es la primera asignatura integrante de la materia de Química Física (33 ECTS en total), que se imparte dentro del módulo de Materias fundamentales (129 ECTS) del 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 conceptos estructurales que, junto con los conceptos termodinámicos y cinéticos propios de otras asignaturas afines, proporcionan la base teórica necesaria para interpretar y predecir los hechos experimentales de la Química.

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 pretende 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.

REQUISITOS Y/O RECOMENDACIONES PARA CURSAR LA ASIGNATURA

Conocimientos teóricos

Para abordar el estudio de esta asignatura se recomienda haber superado la materia de Química que se estudia en el primer curso. 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 ello se ha podido adquirir en las asignaturas precedentes, sin que a este nivel sean necesarios desarrollos más elevados, salvo los que se introduzcan expresamente en esta asignatura.

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 informaciones puntuales en tablas de datos fisicoquímicos
- Elaboración de resúmenes y de fichas conceptuales o bibliográficas
- Manejo de paquetes informáticos, especialmente procesador de textos con editor de ecuaciones (Word o similar) y cálculos estadísticos con regresión lineal (Excel o similar, Origin,...). Opcionalmente, de dibujo de moléculas (ChemSketch, ChemDraw o similar), y en lo posible de tratamiento cuántico de moléculas (Spartan, Gaussian,...)
- Conocimientos básicos de inglés, que permitan con carácter general la consulta de fuentes de conocimiento en este idioma disponibles en libros, revistas, Internet,...

Otras destrezas específicas de tipo matemático son:

- Utilización de equivalencias entre expresiones trigonométricas
- Cálculo de derivadas sencillas: con especial aplicación para determinar máximos y mínimos de funciones
- 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 recomienda la consulta de algún texto de estas materias tales como los de Tipler o Steiner, o bien de otros de que se disponga. La UNED ofrece unos Cursos Cero de Física y Matemáticas que pueden ayudar a refrescar esta formación básica. También puede ser útil disponer de un buen diccionario científico, tal como el Diccionario de Física de Oxford.

EQUIPO DOCENTE

Nombre y Apellidos	FERNANDO PERAL FERNANDEZ
Correo Electrónico	fperal@ccia.uned.es
Teléfono	91398-7383
Facultad	FACULTAD DE CIENCIAS
Departamento	CIENCIAS Y TÉCNICAS FÍSICO-QUÍMICAS

Nombre y Apellidos	CARMEN SANCHEZ RENAMAYOR
Correo Electrónico	csanchez@ccia.uned.es
Teléfono	91398-7386
Facultad	FACULTAD DE CIENCIAS
Departamento	CIENCIAS Y TÉCNICAS FÍSICO-QUÍMICAS

HORARIO DE ATENCIÓN AL ESTUDIANTE

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

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 en los distintos foros que al efecto 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 los foros disponibles en el curso virtual.

Tutorías presenciales

Consulte en su Centro Asociado si existen tutorías presenciales de esta 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 días festivos en la universidad, 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

Carmen Sánchez Renamayor

Despacho 310

Tel.: 91 398 73 86

Horario de guardia: Miércoles de 16 a 20 horas

Correo electrónico: csanchez@ccia.uned.es

TUTORIZACIÓN EN CENTROS ASOCIADOS

COMPETENCIAS QUE ADQUIERE EL ESTUDIANTE

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 Graduado en Química, 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

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 deberían lograrse los siguientes resultados:

- 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.

CONTENIDOS

Tema 1. Introducción a la mecánica cuántica

Tema 2. Estudio de sistemas sencillos I: caja de potencial y efecto túnel

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

Tema 4. Átomo de hidrogeno e hidrogenoides

Tema 5. Átomos dielectrónicos. Métodos aproximados.

Tema 6. Átomos polielectrónicos. 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.

Tema 9. Moléculas diatómicas.

Tema 10. Simetría molecular.

Tema 11. Moléculas poliatómicas.

Tema 12. Propiedades eléctricas y magnéticas de las moléculas

METODOLOGÍA

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 los cursos virtuales de la UNED. A fin de alcanzar los resultados de aprendizaje de un modo eficiente, se recomienda seguir la secuencia de actividades que se describen a continuación.

Estudio de los contenidos teóricos del programa.

El programa de la asignatura se desarrolla en un conjunto de 12 Temas que han sido preparados por el equipo docente teniendo en cuenta las características peculiares del estudio a distancia, y que estarán a disposición de los estudiantes dentro de la plataforma virtual al comienzo del curso. En todos ellos se incluyen los siguientes elementos:

1. Listado de conocimientos básicos previos al estudio de cada uno de los Temas.

2. Formulación de los objetivos específicos de cada Tema.
3. Desarrollo de los contenidos de cada Tema, con las explicaciones de los conceptos básicos de cada uno de los apartados que los componen.
4. Relación sucinta de referencias bibliográficas especialmente relevantes.
5. Actividades propuestas, constituidas por cuestiones y problemas de los que se facilitan las soluciones completas.

Se sugiere una lectura inicial de los Temas a fin de conseguir una perspectiva de conjunto, identificando los conceptos más esenciales, para abordar después el estudio detallado, recurriendo en caso necesario a la consulta de los textos recomendados.

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 que se incluyen al final de cada Tema, de los que pueden consultarse las soluciones, disponibles a continuación de los enunciados.

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 completa 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 %

SISTEMA DE EVALUACIÓN

TIPO DE PRUEBA PRESENCIAL

Tipo de examen	Examen de desarrollo
Preguntas desarrollo	12
Duración del examen	120 (minutos)
Material permitido en el examen	

Calculadora no programable

Criterios de evaluación

La Prueba presencial tiene dos horas de duración y consta de dos partes. La primera consiste en 10 cuestiones tipo test que pueden tener una o varias respuestas válidas. Tenga en cuenta que no sólo debe señalar las que considere correctas, sino que **es necesario justificar brevemente las respuestas elegidas**. La segunda parte consiste en la resolución de problemas. Se le propondrán tres pero debe resolver sólo dos, a su elección. Debe explicar los razonamientos e interpretar los resultados que obtenga. Se valorará que todas las respuestas estén elaboradas de modo personal, evitando la simple memorización y la repetición textual de los materiales didácticos y obras de consulta. También se valorará la claridad, la forma de expresión y la presentación del examen.

Cuando se enfrente al examen realice una primera lectura del mismo. Después intente resolverlo y preste especial atención en la organización del tiempo promediando el que debería invertir para cada pregunta.

Para la calificación de la Prueba presencial, las cuestiones y los problemas contribuyen al 50%. Cada cuestión contestada correctamente de forma completa vale 1 punto. Cada problema resuelto correctamente de forma completa vale 5 puntos.

% del examen sobre la nota final	90
Nota del examen para aprobar sin PEC	5,6
Nota máxima que aporta el examen a la calificación final sin PEC	9
Nota mínima en el examen para sumar la PEC	0

Comentarios y observaciones

La Prueba presencial se realiza en los Centros Asociados. Para conocer el día y la hora en la que debe presentarse ha de consultar el calendario elaborado por la UNED y que se publica en la página web o bien estará disponible en su Centro Asociado. Para esta asignatura, la convocatoria ordinaria es la de febrero. En caso de no superar el examen o no presentarse a él, dispondrá también de la convocatoria extraordinaria de septiembre. El único material que se permite en el examen es una calculadora (sin textos).

PRUEBAS DE EVALUACIÓN CONTINUA (PEC)

¿Hay PEC?

Descripción

Existen dos PEC que estarán disponibles oportunamente en el curso virtual de la asignatura. La primera abarca los contenidos de los Temas 1 al 6 y la segunda, los de los Temas 7 al 12. La estructura de cada PEC es parecida a la del examen. Tiene dos partes. La primera parte consta de diez preguntas tipo test, que pueden tener una o varias respuestas válidas. Debe señalar las que considere correctas y además justificar brevemente la respuesta. La segunda parte consiste en la resolución de dos problemas. Debe desarrollarlos justificando el procedimiento adoptado y comentando el resultado final.

Criterios de evaluación

Los encargados de **corregir y calificar las PEC son los Tutores Intercampus**, quienes una vez corregidas se las devolverán para que pueda comprobar sus resultados y reforzar el estudio de aquellos aspectos en los que ha fallado. Recuerde que **cada PEC contribuye con un 5% a la calificación final del curso en la convocatoria ordinaria.**

Ponderación de la PEC en la nota final	10% en conjunto
Fecha aproximada de entrega	PEC1: 26-11 y PEC2: 8-1
Comentarios y observaciones	

Las fechas exactas de entrega de las PEC se publicarán en el curso virtual de la asignatura. Le recomendamos que realice estas Pruebas tras finalizar el estudio de los temas correspondientes y después de haber resuelto los ejercicios de autocomprobación que se le han facilitado, que son análogos a los de las PEC. Los principales objetivos que se pretenden con esta actividad por parte del estudiante son los siguientes:

Comprobar si ha adquirido los conocimientos necesarios al estudiar los Temas del programa

Tomar conciencia del progreso de su estudio

Servir como ensayo de la prueba presencial final de la asignatura

Debe entregar las PEC mediante la plataforma del curso virtual y respetar la fecha y hora de entrega límite, ya que el sistema no admitirá envíos con posterioridad. Las fechas de entrega de estas pruebas se anunciarán oportunamente en el curso virtual.

OTRAS ACTIVIDADES EVALUABLES

¿Hay otra/s actividad/es evaluable/s?

Descripción

Criterios de evaluación

Ponderación en la nota final 0

Fecha aproximada de entrega

Comentarios y observaciones

¿CÓMO SE OBTIENE LA NOTA FINAL?

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

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

En la convocatoria extraordinaria de Septiembre, la calificación final será la obtenida en la Prueba presencial.

La nota final de la asignatura se califica con un máximo de diez puntos, y la calificación de "aprobado" se obtiene con un mínimo de cinco puntos.

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

ISBN(13):9789500612487

Título:QUÍMICA FÍSICA (8ª edición)

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

Editorial:Editorial Médica Panamericana, Buenos Aires, 2008

El texto que se recomienda como bibliografía básica de consulta para esta asignatura es el siguiente:

- Autores: ATKINS, Peter y DE PAULA Julio
- Título: Química Física. 8ª edición.
- Editorial Médica Panamericana, Buenos Aires, 2008.
- ISBN = 978-950-06-1248-7

Este texto se divide en tres partes: Equilibrio, Estructura y Cambio. En concreto, 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 especialmente al programa.

Los contenidos de este texto se consideran de referencia en todo el mundo. Incluyen explicaciones y desarrollos bastante claros y completos, 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. Además está coordinado con contenidos accesibles en Internet, tales como presentaciones, datos y gráficos complementarios, así como enlaces a otros sitios de interés.

La función que cumple este texto en la preparación de la asignatura es la de aportar materiales suficientemente detallados que permitan completar el estudio de los Temas del programa, preparados por el equipo docente y disponibles en el curso virtual, a los estudiantes interesados.

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:U.N.E.D.

ISBN(13):9788448137878

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

Autor/es:Levine, Ira N. ;

Editorial:Ariel Ciencia

ISBN(13):9788448198336

Título:PROBLEMAS DE FISICOQUÍMICA

Autor/es:Levine, Ira N. ;

Editorial:: MCGRAW-HILL INTERAMERICANA DE ESPAÑA

ISBN(13):9788478290772

Título:QUÍMICA FÍSICA (2006)

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

Editorial:PEARSON ADDISON-WESLEY

ISBN(13):9788496477483

Título:PROBLEMAS DE QUÍMICA FÍSICA (2006)

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

Editorial:Delta Publicaciones Universitarias

Se ha seleccionado en la bibliografía complementaria una representación de textos actuales publicados en español 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 libros*.

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.

RECURSOS DE APOYO Y WEBGRAFÍA

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 los cursos virtuales de la UNED. Albergará materiales necesarios para la preparación de la asignatura, tales como el Plan de trabajo y orientaciones para su desarrollo, los Temas que componen el programa, las Pruebas de Evaluación Continua (PEC) y las grabaciones de las tutorías que se impartan durante el curso. También ofrecerá foros de discusión para consultas generales y de contenidos de la asignatura.

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 se encontrará una colección de programas de radio de la UNED elaborados por el equipo docente, en formato mp3. También se recomienda el video "15 minutos en la vida del electrón", al que puede acceder mediante el siguiente enlace:
<https://canal.uned.es/mmobj/index/id/9079>

IGUALDAD DE GÉNERO

En coherencia con el valor asumido de la igualdad de género, todas las denominaciones que en esta Guía hacen referencia a órganos de gobierno unipersonales, de representación, o miembros de la comunidad universitaria y se efectúan en género masculino, cuando no se hayan sustituido por términos genéricos, se entenderán hechas indistintamente en género femenino o masculino, según el sexo del titular que los desempeñe.