Facultad de Ciencias

Grado en Química

GUÍA DOCENTE DE LA ASIGNATURA (ESCENARIO 0):

Química Cuántica y Termodinámica Estadística
(2021 - 2022)

1. Datos descriptivos de la asignatura

Asignatura: Química Cuántica y Termodinámica Estadística	Código: 329172103

- Centro: **Facultad de Ciencias**
- Lugar de impartición: **Facultad de Ciencias**
- Titulación: **Grado en Química**
- Plan de Estudios: **2009 (Publicado en 2009-11-25)**
- Rama de conocimiento: **Ciencias**
- Itinerario / Intensificación:
- Departamento/s:
  Química
- Área/s de conocimiento:
  Química Física
- Curso: **2**
- Carácter: **Obligatoria**
- Duración: **Primer cuatrimestre**
- Créditos ECTS: **6,0**
- Modalidad de impartición: **Presencial**
- Horario: **Enlace al horario**
- Dirección web de la asignatura: **http://www.campusvirtual.ull.es**
- Idioma: **Castellano e Inglés (0,3 ECTS en Inglés)**

2. Requisitos para cursar la asignatura

Requisitos previos recomendados: En esta asignatura es muy importante tener buenos conocimientos en vectores, números complejos, matrices y cálculo diferencial e integral; por lo que se recomienda tener aprobado Fundamentos de Matemáticas, Fundamentos de Física, Fundamentos de Química, Matemáticas, Física y Química General y estar cursando Química Física.

3. Profesorado que imparte la asignatura

Profesor/a Coordinador/a: ALBERTO HERNANDEZ CREUS

- Grupo: **1, PE101, PE102, PE103, TU101, TU102**

General
- Nombre: **ALBERTO**
- Apellido: **HERNANDEZ CREUS**
- Departamento: **Química**
- Área de conocimiento: **Química Física**

Contacto
- Teléfono 1: **922318021**
- Teléfono 2:
- Correo electrónico: **ahcreus@ull.es**
- Correo alternativo: **ahcreus@ull.edu.es**
- Web: **http://www.campusvirtual.ull.es**

Tutorías primer cuatrimestre:

Desde	Hasta	Día	Hora inicial	Hora final	Localización	Despacho
Todo el cuatrimestre		Martes	14:30	16:30	Sección de Química - AN.3F	7
Todo el cuatrimestre		Miércoles	14:30	16:30	Sección de Química - AN.3F	7
Todo el cuatrimestre		Jueves	14:30	16:30	Sección de Química - AN.3F	7

Observaciones: Las tutorías no presenciales se disponen en el mismo horario que las presenciales. Las tutorías no presenciales se desarrollarán por videollamada a través de Google Meet o sistema similar. Para concretar una tutoría no presencial los alumnos deben primero acordar por email fecha y hora con el profesor. Este método puede servir, además, para hacer tutorías fuera del horario previsto siempre que sea posible.

Tutorías segundo cuatrimestre:

Desde	Hasta	Día	Hora inicial	Hora final	Localización	Despacho
Todo el cuatrimestre		Martes	14:30	16:30	Sección de Química - AN.3F	7
Todo el cuatrimestre		Miércoles	14:30	16:30	Sección de Química - AN.3F	7
Todo el cuatrimestre		Jueves	14:30	16:30	Sección de Química - AN.3F	7

Observaciones:

4. Contextualización de la asignatura en el plan de estudio

Bloque formativo al que pertenece la asignatura: **Química Física**
Perfil profesional:

5. Competencias

Específica

CET01 - Aspectos principales de terminología química, nomenclatura, convenios y unidades
CET11 - Relación entre propiedades macroscópicas y propiedades de átomos y moléculas individuales: incluyendo macromoléculas (naturales y sintéticas), polímeros, coloides y otros materiales
CEP03 - Reconocer y analizar nuevos problemas y planear estrategias para solucionarlos
CEP13 - Capacidad para relacionar la Química con otras disciplinas

General

CG04 - Resolución de problemas
CG10 - Reconocimiento a la diversidad y la multiculturalidad
CG11 - Razonamiento crítico

Básica

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

6. Contenidos de la asignatura

Contenidos teóricos y prácticos de la asignatura

Tema 1. Orígenes de la Mecánica Cuántica. Naturaleza ondulatoria de la radiación electromagnética. Radiación de cuerpo negro. Efecto fotoeléctrico. Naturaleza corpuscular de la radiación electromagnética. Hipótesis de de Broglie. Átomo e hipótesis de Bohr. Incertidumbre. Concepto de absorción y emisión de radiación electromagnética.

Tema 2. Bases físico-matemáticas de la Mecánica Cuántica. Concepto de probabilidad. Álgebra de operadores. Ecuación de Schrödinger. La partícula confinada: la partícula en la caja. Postulados de la MC. Notación de Dirac. Teoremas básicos de la MC. Bases de la espectroscopía de absorción y emisión electrónica en átomos. La PIB en 3D: el microscopio de efecto túnel, teoría de bandas para electrones de valencia y de conducción en un metal, nivel de Fermi.

Tema 3. Modelo de movimiento vibratorio. El oscilador armónico. Cuantización de la vibración de dos masas conectadas. El oscilador anarmónico. Bases de la espectroscopia IR y de dispersión Raman. Modelo de movimiento rotatorio. El momento angular. La partícula en el anillo. El rotor rígido. Los armónicos esféricos. Representación espacial.

Tema 4. El átomo de hidrógeno. Función de distribución radial. Orbitales hidrogenoides. El átomo de helio. El espín electrónico. Principio de Pauli. El método variacional. El método de perturbaciones independiente del tiempo. El átomo de helio excitado. Átomos polielectrónicos. Bases de la espectroscopía de resonancia de espín.

Tema 5. La molécula ion H2+. La aproximación de Born-Oppenheimer. Método de los electrones de valencia y de los orbitales moleculares. La molécula de H2. Introducción al enlace químico en moléculas diatómicas homo y heteronucleares. Método CLOA. Diagramas de energía.

Tema 6. Fundamentos de la Termodinámica Estadística. Probabilidad y función de distribución de probabilidad. Postulado de Boltzmann. Estados, microestados y configuraciones. Partículas discernibles y no discernibles. Estadísticas de Maxwell-Boltzmann, de Bose-Einstein y de Fermi-Dirac. Distribución más probable. Funciones de partición. Grados de libertad. El Teorema de equipartición de la energía. Cálculo de funciones termodinámicas.

Actividades a desarrollar en otro idioma

En todas las tutorías al menos una de las preguntas con conceptos, teoría y problemas numéricos se hace en inglés y su respuesta también debe ser inglés. Además se hace el análisis y discusión en seminarios de artículos de investigación originales en inglés.

7. Metodología y volumen de trabajo del estudiante

Descripción

Actividad presencial.
Las clases teóricas constituyen un aspecto fundamental de esta asignatura. En ellas se exponen y desarrollan los aspectos esenciales de cada tema y son una pieza esencial de la docencia. Se indican los puntos importantes y se especifica cómo abordar su estudio. Se hace uso extensivo de pizarra, apoyado en transparencias, cañón de proyección y todo tipo documentos ya elaborados y repartidos previamente a través del aula virtual. Los alumnos disponen del material antes de cada clase. En cada tema se indica la documentación o consulta bibliográfica obligatoria que cada alumno debe realizar. En las clases de problemas se resuelven con detalle problemas numéricos cualitativos y cuantitativos. Estos problemas son siempre problemas-ejemplo para que quede claro la aplicación concreta de los contenidos teóricos. Los alumnos tienen además listas de problemas similares o equivalentes, que deben ser resueltos y presentados según se les va indicando. Siempre que sea posible se obvian demostraciones matemáticas complejas, pero sin llegar al extremo de simplificar en exceso contenidos necesarios.

A lo largo del curso se va estableciendo un amplio formulario matemático de la asignatura, igual para todos, en donde se recogen todas las fórmulas necesarias y que los alumnos deben llevar cada día y usar en los exámenes correspondientes. Esto elimina o limita errores de memoria por recordar mal las fórmulas y, al mismo tiempo, permite hacer preguntas sobre el significado teórico profundo de las mismas.

Antes de cada tema y a través del aula virtual se reparte uno o varios documentos, en los que se recoge de manera detallada los siguientes puntos:
• Título del tema y objetivo del tema.
• Ideas que el alumno debe entender y dominar.
• Epígrafes que constituyen el tema con un amplio desarrollo de los mismos.
• Lista de problemas. Incluye algunos como ejemplo.
• Bibliografía recomendada.

Este documento, que en modo alguno se considera sustitutivo de la obligada consulta bibliográfica, presenta sin embargo

varias ventajas. En primer lugar resume todo el contenido del tema, de las ideas fundamentales que contiene, de la importancia de las mismas y en el mismo orden en que van a ser expuestos. Permite la inclusión de todos los desarrollos matemáticos, tan abundantes y casi siempre complicados en Mecánica Cuántica, con independencia de que dichos desarrollos vayan luego a ser contemplados en mayor o menor intensidad en los exámenes y tutorías correspondientes. Constituye un medio muy dinámico de comunicación con los alumnos porque es fácilmente modificable sobre la marcha de las propias clases y, por último, evita al alumno estar completamente pendiente de "tomar apuntes" de todo lo que escucha, puesto que ya lo tiene escrito delante, lo que supone capturar con mucha mayor eficacia la atención de los alumnos.

La docencia presencial se complementa con las correspondientes clases previstas de seminarios, problemas, tutorías y tutorías asistenciales.

En general los seminarios se dedican especialmente a discutir aspectos esenciales previamente propuestos en clase para que los preparen. En los seminarios, que se intercalan entre las clases de teoría, los alumnos deben exponer y defender su grado de compresión de la materia tratada y resolver dudas.

En las tutorías se abordan, en pequeños grupos, diversos ejercicios y cuestiones específicas escogidas de un grupo de ejercicios previamente propuestos. Su realización es obligatoria y su resultado es evaluado con una nota.

Las tutorías de despacho o asistenciales, tienen por finalidad resolver dudas, cuestiones o cualquier otro aspecto de la asignatura en horario ajeno al de impartición de clases.

La asistencia a todas las clases, a los seminarios y a las tutorías es considerada obligatoria dentro del marco del Grado en Química, por lo tanto se hace un seguimiento de la asistencia a clase.

Actividad no presencial.
En todo momento a lo largo del curso se hará uso continuado del aula virtual. Tras cada tema los alumnos deben hacer cuestionarios de diverso tipo tanto de autoevaluación como de ejercicio puntuable Así mismo se indican problemas numéricos y/o teóricos, buscar información y discutirla, etc., y, por supuesto, se usa abundantemente como herramienta para el intercambio continuo de documentos, archivos de datos y/o contenidos, material gráfico (esquemas, dibujos, representaciones y videos) y como soporte para resolver dudas y sistema general de comunicación. Se hace un uso especial de los distintos formatos de cuestionarios que el aula virtual brinda: de respuesta múltiple, de verdadero/falso, de tiempo limitado y de varias posibilidades de repetición.

Esta asignatura se desarrolla sobre todo haciendo problemas. Por tanto en cada tema se resuelven en clase los problemas-tipo fundamentales y luego se distribuyen listas de problemas que los alumnos deberán entregar a través del aula virtual o correo electrónico o incluso en papel en el tiempo y forma establecidos encada caso.

Los contenidos de esta asignatura se complementan con diversas clases en el aula de informática. Estas clases corresponden a la asignatura de "Introducción Experimental en Química Física" de 2º de Grado y primer cuatrimestre, es decir, en paralelo con la presente asignatura, y en cuya guía docente se detalla su metodología. En las clases en el aula de informática se aborda la mayor cantidad posible de aspectos matemáticos de la asignatura a través de diverso software específico para este tipo de materias. Se ha procurado, dentro de las limitaciones de horario, aprovechar al máximo el tiempo de las clases en el aula de informática para desarrollar con el mayor detalle posible aspectos que no pudieron ser vistos en clase con el sosiego adecuado y, además, se abordan aspectos totalmente nuevos no vistos con anterioridad. Los alumnos deben trabajar autónomamente y elaborar un detallado informe de cada clase que será discutido con el profesor.

La asignatura está organizada de tal manera que las prácticas en el aula de informática tienen lugar los últimos seis o siete lunes del cuatrimestre durante cuatro horas. Este hecho contiene la ventaja de que las bases teóricas de la la totalidad de las

prácticas que se realizan han sido ya completamente tratadas en las clases ordinarias.

Actividades formativas en créditos ECTS, su metodología de enseñanza-aprendizaje y su relación con las competencias que debe adquirir el estudiante

Actividades formativas	Horas presenciales	Horas de trabajo autónomo	Total horas	Relación con competencias
Clases teóricas	38,00	57,00	95,0	[CB2], [CB1], [CG11], [CG10], [CG04], [CEP13], [CEP03], [CET11], [CET01]
Realización de seminarios u otras actividades complementarias	5,00	7,50	12,5	[CB2], [CB1], [CG11], [CG10], [CG04], [CEP13], [CEP03], [CET11], [CET01]
Realización de exámenes	4,00	6,00	10,0	[CB2], [CB1], [CG11], [CG10], [CG04], [CEP13], [CEP03], [CET11], [CET01]
Asistencia a tutorías	6,00	9,00	15,0	[CB2], [CB1], [CG11], [CG10], [CG04], [CEP13], [CEP03], [CET11], [CET01]
Resolución de problemas	7,00	10,50	17,5	[CB2], [CB1], [CG11], [CG10], [CG04], [CEP13], [CEP03], [CET11], [CET01]
Total horas	60,00	90,00	150,00	
		Total ECTS	6,00	

8. Bibliografía / Recursos

Bibliografía Básica

-Physical Chemistry, P. Atkins, J. de Paula. Oxford University, USA, 2008

-Química Física, Thomas Engel, Philip Reid, Pearson Addison Wesley, 2006.
-Quantum Chemistry, Donald Mc Quarrie, Oxford University Press, 1983.

Bibliografía Complementaria

-Ejercicios Computacionales de Mecánica Cuántica y Termodinámica Estadística, M. Rodríguez González, P. Carro Reglero, A. Hernández Creus, 2018.
ISBN: 978-84-09-02253-4.

Otros Recursos

-Diversas páginas webs de contenido interactivo con los temas de la asignatura: especialmente páginas relacionadas con modelización y visualización de los modelos mecanocuánticos de la partícula confinada, el oscilador armónico y los orbitales atómicos. Además se visualizan páginas webs de cálculo mecanocuántico y representación gráfica avanzada.
-Artículos de investigación tomados del Journal of Chemical Education sobre los sistemas vistos en clase: partícula confinada, oscilador armónico, rotor rígido, moléculas diatómicas y termodinámica estadística.

9. Sistema de evaluación y calificación

Descripción

Evaluación continua.
La calificación de la convocatoria de enero se basará en la evaluación continua que consta de los siguientes elementos:
1) Actividades y tareas realizadas en tutorías, exámenes parciales, seminarios, clases de problemas y toda la actividad evaluable a través del aula virtual como cuestionarios, problemas cortos, resúmenes, edición de material audiovisual, etc., será evaluada y representará el 40% de la calificación final.
2) Prueba final escrita de los contenidos de la asignatura (problemas numéricos y preguntas de desarrollo para razonar) y representará el 60%.
La calificación final de todo alumno que obtenga 3.5 (sobre 10) o más en los dos apartados anteriores, será la media ponderada de ambos apartados. En caso de que esta media ponderada sea menor que la nota obtenida en el examen final, se tomará esta última como calificación final del alumno.
Para superar la asignatura en esta convocatoria de enero, es necesario obtener una calificación final de como mínimo 5 sobre 10, asistir al 100% de los seminarios y tutorías y al menos al 80% de las clases magistrales.

Evaluación alternativa.
Para aquellos alumnos que no cumplan las condiciones establecidas para la evaluación continua, se realizará un examen final específico, distinto al del apartado 2) y que podrá ser oral si así se estima.
En el resto de las convocatorias se establecerá un único examen escrito cuya nota determinará el 100% de la calificación final.

Evaluación en 5ª y 6ª convocatoria.
Los alumnos en 5ª y 6ª convocatoria solo podrán optar a la evaluación continua si renuncian al tribunal de examen de 5ª y 6ª convocatoria. En caso de no hacerlo solo podrán optar a la evalucaión alternativa.

Estrategia Evaluativa

Tipo de prueba	Competencias	Criterios	Ponderación

Pruebas de respuesta corta	[CB2], [CB1], [CG11], [CG10], [CG04], [CEP13], [CEP03], [CET11], [CET01]	Dominio de los conocimientos teóricos, razonamiento científico crítico en problemas teóricos y numéricos, capacidad de expresión, de análisis y de síntesis.	40,00 %
Pruebas de desarrollo	[CB2], [CB1], [CG11], [CG10], [CG04], [CEP13], [CEP03], [CET11], [CET01]	Dominio de los conocimientos teóricos, razonamiento científico crítico en problemas teóricos y numéricos, capacidad de expresión, de análisis y de síntesis.	60,00 %

10. Resultados de Aprendizaje

- Usar los principios de la Química Cuántica para la descripción de las propiedades de átomos y moléculas.
- Establecer el origen de los fenómenos espectroscópicos y entender el fundamento cuántico de las diferentes técnicas.
- Relacionar las propiedades macroscópicas y microscópicas de la materia haciendo uso de la Termodinámica Estadística.

11. Cronograma / calendario de la asignatura

Descripción

Para estar mejor informado sobre el calendario de las diferentes actividades de la asignatura así como la fecha de todas las actividades previstas.se debe consultar el siguiente enlace:
https://www.ull.es/grados/quimica

La distribución de los temas por semana en el cronograma es orientativa, pudiendo sufrir cambios según las necesidades de organización docente.

Primer cuatrimestre					
Semana	**Temas**	**Actividades de enseñanza aprendizaje**	**Horas de trabajo presencial**	**Horas de trabajo autónomo**	**Total**
Semana 1:	Tema 1	Clases de teoría: 4 Seminario: 1	5.00	7.50	12.50
Semana 2:	Tema 1 Tema 2	Clases de teoría: 4 Seminario: 1	5.00	7.50	12.50
Semana 3:	Tema 2	Clases de teoría: 2	2.00	3.00	5.00
Semana 4:	Tema 2	Clases de teoría: 3 Tutoría: 1	4.00	6.00	10.00
Semana 5:	Tema 2	Clases de teoría: 3 Seminario: 1	4.00	6.00	10.00

Semana 6:	Tema 2	Clases de teoría: 2 Tutoría: 1	3.00	4.50	7.50
Semana 7:	Tema 3	Clases de teoría: 4 Seminario: 1	5.00	7.50	12.50
Semana 8:	Tema 3 Tema 4	Clases de teoría: 4	4.00	6.00	10.00
Semana 9:	Tema 4	Clases de teoría: 3 Tutoría: 1	4.00	6.00	10.00
Semana 10:	Tema 4 Tema 5	Clases de teoría: 3	3.00	4.50	7.50
Semana 11:	Tema 5	Clases de teoría: 2 Tutoría: 1	3.00	4.50	7.50
Semana 12:	Tema 5	Clases de teoría: 4	4.00	6.00	10.00
Semana 13:	Tema 6	Clases de teoría: 2 Seminario: 1	3.00	4.50	7.50
Semana 14:	Tema 6	Clases de teoría: 3 Tutoría: 1	4.00	6.00	10.00
Semana 15:	Tema 6	Clases de teoría: 2 Tutoría: 1	3.00	4.50	7.50
Semana 16 a 18:	Evaluación	Evaluación y trabajo autónomo del alumno para la preparación de la evaluación...	4.00	6.00	10.00
		Total	60.00	90.00	150.00