

PLANIFICACIÓN DOCENTE CURSO 2006-07

PLAN DOCENTE DE ASIGNATURA

CÓDIGO NOMBRE

Asignatura	206010	QUIMICA FISICA
Titulación	0206	LICENCIATURA EN QUÍMICA
Departamento	C127	QUIMICA FISICA
Curso	2	
Duración (A: Anual, 1Q/2Q)	1Q	
Créditos ECTS	7,8	

Créditos Teóricos 6

Créditos Prácticos 3

Tipo Troncal

Profesores	Concepción Fernández Lorenzo M. Pilar Martínez Brell
Objetivos	<p>La asignatura se ha dividido en cuatro bloques de acuerdo con sus descriptores. Los objetivos básicos que se persiguen en esta asignatura para cada uno de los bloques, son los siguientes:</p> <p>Bloque I. Estructura atómica.</p> <p>1) Establecer los aspectos experimentales y las primeras aproximaciones teóricas que sirvieron como punto de partida para la concepción actual de la estructura de la materia.</p> <p>2) Hacer una introducción a los fundamentos del método mecanocuántico, dejando</p>

Código Seguro de verificación: K+ODXBtN2v1KC+G0dTIYpg==. Permite la verificación de la integridad de una copia de este documento electrónico en la dirección: <https://verificarfirma.uca.es>
Este documento incorpora firma electrónica reconocida de acuerdo a la Ley 59/2003, de 19 de diciembre, de firma electrónica.

FIRMADO POR	MARIA DEL CARMEN JAREÑO CEPILLO	FECHA	13/07/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	1/8



K+ODXBtN2v1KC+G0dTIYpg==

clara su naturaleza y haciendo hincapié en el significado de la función de onda.

3)Aplicar el tratamiento mecanocuántico a sistemas físicos sencillos con soluciones exactas.

4)Aplicar el tratamiento mecanocuántico a sistemas químicos sencillos como el átomo de hidrógeno y átomos hidrogenoides.

5)Comprender los métodos aproximados para el tratamiento de sistemas más complejos.

6)Comprender la ordenación de los elementos en la tabla periódica y justificar el comportamiento de los distintos elementos.

Bloque II. Estructura Molecular y Teoría del Enlace Químico.

1)Discutir los conceptos básicos implícitos en la separación de los movimientos electrónicos y nucleares, y la subsiguiente separación de los movimientos de traslación, rotación y vibración.

2)Comprender el fundamento del método de orbitales moleculares y de enlace valencia.

3)Aplicar los métodos teóricos y sus aproximaciones para el estudio de los enlaces químicos en sistemas de complejidad creciente.

4)Introducir las ideas sobre las que se fundamentan los métodos de la Química Computacional.

5)Aplicar el método de OM y, en concreto, la aproximación de Hückel a moléculas conjugadas y aromáticas.

Bloque III. Cinética Química.

1)Manejar los conceptos y las definiciones básicas de la Cinética Química

2)Adquirir una visión global de las distintas teorías que permiten una interpretación de las ecuaciones empíricas a partir de las propiedades de las moléculas que intervienen en la

Código Seguro de verificación:K+ODXBtN2v1KC+G0dTIYpg==. Permite la verificación de la integridad de una copia de este documento electrónico en la dirección: <https://verificarfirma.uca.es>
Este documento incorpora firma electrónica reconocida de acuerdo a la Ley 59/2003, de 19 de diciembre, de firma electrónica.

FIRMADO POR	MARIA DEL CARMEN JAREÑO CEPILLO	FECHA	13/07/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	2/8
 K+ODXBtN2v1KC+G0dTIYpg==			

	<p>reacción.</p> <p>3) Estudiar diferentes tipos de reacciones: en distintas fases, en cadena, etc.</p> <p>4) Adquirir unas breves nociones sobre catálisis y sus tipos.</p> <p>5) Conocer los fundamentos básicos de la Fotoquímica y los principios que gobiernan la absorción fotónica.</p> <p>Bloque IV. Electroquímica.</p> <p>1) Manejar los conceptos y las definiciones básicas de la Electroquímica:</p> <p>2) Aplicar las leyes que expresan la variación de la conductividad molar con la concentración.</p> <p>3) Conocer los diferentes tipos de electrodos, patrones y secundarios.</p> <p>4) Calcular la fuerza electromotriz que se genera por la unión de dos o más electrodos, con la definición de pila y célula galvánica así como sus clasificaciones.</p> <p>5) Aplicar los conceptos electroquímicos adquiridos en la determinación de diversas propiedades.</p>
Programa	<p>I. Estructura Atómica</p> <p>Tema 1.- Estructura atómica. Generalidades. Radiación del cuerpo negro y cuantización de la energía.- Efecto fotoeléctrico.- Espectro del hidrógeno; Interpretación según las primitivas teorías atómicas: Modelo de Bohr, Modelo de Sommerfeld.- Los números cuánticos.- Insuficiencia de estos modelos.</p> <p>Tema 2.- Introducción a la Mecánica Cuántica Bases de la Mecánica Cuántica: Dualidad onda-corpúsculo. Principio de incertidumbre de Heisenberg.- Origen de la ecuación de Schrödinger. Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo: Estados estacionarios.- Separación de variables.</p>

Código Seguro de verificación:K+ODXBtN2v1KC+G0dTIYpg==. Permite la verificación de la integridad de una copia de este documento electrónico en la dirección: <https://verificarfirma.uca.es>
Este documento incorpora firma electrónica reconocida de acuerdo a la Ley 59/2003, de 19 de diciembre, de firma electrónica.


FIRMADO POR	MARIA DEL CARMEN JAREÑO CEPILLO	FECHA	13/07/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	3/8



K+ODXBtN2v1KC+G0dTIYpg==


	<p>Tema 3.- Aplicación de la ecuación de Schrödinger a sistemas sencillos Partícula libre.- Partícula en una caja monodimensional.- Caja tridimensional: Estados degenerados. Oscilador armónico: Efecto túnel.- Rotor rígido: Momento angular.</p> <p>Tema 4.- El átomo de hidrógeno. Ecuación de ondas para el átomo de hidrógeno.- Función de onda radial y angular.- Forma y tamaño de los orbitales atómicos.- Impulso angular orbital.- Espín del electrón.- Impulso angular total.- Energía de los orbitales. Espectro de los átomos hidrogenoides.</p> <p>Tema 5.- Átomos polieletrónicos I. Métodos aproximados para resolver la ecuación de Schrödinger: variaciones y perturbaciones.- Método del campo autoconsistente.- Orbitales aproximados de Slater.- Funciones de onda simétricas y antisimétricas.- Principio de exclusión de Pauli.</p> <p>Tema 6.- Átomos polieletrónicos II. Propiedades periódicas.- Origen de los términos espectrales.- Efecto de los campos eléctricos.- Efecto de los campos magnéticos.</p> <p>II. Estructura Molecular y Teoría del Enlace Químico.</p> <p>Tema 7.- La naturaleza del enlace químico. El hamiltoniano molecular: Significado de cada una de las contribuciones. Aproximación de Born Oppenheimer: Separación de las contribuciones electrónica y nuclear. Ecuación de ondas electrónica. Separación de las contribuciones de traslación, de rotación y de vibración. Ecuación de ondas nuclear. Limitaciones de la aproximación de Born Oppenheimer.</p> <p>Tema 8.- Molécula de hidrógeno.</p>
--	--

Código Seguro de verificación:K+ODXBtN2v1KC+G0dTIYpg==. Permite la verificación de la integridad de una copia de este documento electrónico en la dirección: <https://verificarfirma.uca.es>
Este documento incorpora firma electrónica reconocida de acuerdo a la Ley 59/2003, de 19 de diciembre, de firma electrónica.

FIRMADO POR	MARIA DEL CARMEN JAREÑO CEPILLO	FECHA	13/07/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	K+ODXBtN2v1KC+G0dTIYpg==	PÁGINA 4/8
			
K+ODXBtN2v1KC+G0dTIYpg==			

	<p>Enlace químico. Fundamentos de las teorías mecanocuánticas del enlace químico: Hipótesis básicas y aproximaciones. Método de orbitales moleculares.</p> <p>Aproximación CLOA. Estudio de la molécula ión de hidrógeno, H₂⁺. Estudio de la molécula de hidrógeno. Características energéticas y estructurales de los enlaces.</p> <p>Tema 9.- Moléculas diatómicas. Generalización del método de OM a moléculas diatómicas: Orbitales moleculares sigma y pi enlazante y antienlazante. Niveles de energía. Diagramas de correlación. Poblaciones electrónicas: carácter iónico o covalente del enlace.- Electronegatividad. El método de enlaces de valencia (EV): características y limitaciones.</p> <p>Tema 10.- Moléculas poliatómicas. Estructura electrónica de las moléculas poliatómicas. Aplicación del método OM. Aproximación CLOA. Orbitales atómicos localizados: Teoría de hibridación. Principales tipos de orbitales híbridos. Ideas actuales acerca del estudio mecanocuántico de las moléculas poliatómicas: Métodos "ab initio" y semiempíricos.</p> <p>Tema 11.- Moléculas conjugadas y aromáticas. Conjugación y resonancia. Mesomería. Aplicación del método OM: Separación. Aproximación de Hückel: Estudio del benceno, de hidrocarburos polibencénicos y de moléculas heterocíclicas y sustituidas. Índices de reactividad: Densidad de carga. Orden de enlace móvil. Valencia libre. Orden total de enlace. Diagramas moleculares. Reactividad química.</p> <p>III- Electroquímica</p> <p>Tema 12.- Disoluciones de</p>
--	--

Código Seguro de verificación:K+ODXBtN2v1KC+G0dTIYpg==. Permite la verificación de la integridad de una copia de este documento electrónico en la dirección: <https://verificarfirma.uca.es>
Este documento incorpora firma electrónica reconocida de acuerdo a la Ley 59/2003, de 19 de diciembre, de firma electrónica.

FIRMADO POR	MARIA DEL CARMEN JAREÑO CEPILLO	FECHA	13/07/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	K+ODXBtN2v1KC+G0dTIYpg==	PÁGINA 5/8
			
K+ODXBtN2v1KC+G0dTIYpg==			

electrólitos.
 Leyes de Faraday.- Conductividad específica y molar.- Electrólitos débiles:
 teoría de Arrhenius.- Electrólitos fuertes.- Teoría de Debye-Hückel-Onsager.-
 Ley de Kohlrausch de la migración independiente de los iones.- Índices de transporte.

Tema 13.- La interfase electrodo-electrólito.
 La doble capa eléctrica.- Sobretensión y polarización.- Ecuación de Butler-Volmer.

Tema 14.- Celdas electroquímicas. Definiciones y generalidades.- Descripción y funcionamiento de una pila electroquímica sencilla.- Medida de la fuerza electromotriz de una pila.- Pilas patrón.- Ley de Nernst.- Tipos de electrodo.- Potenciales estándar de electrodo.- Tipos de celdas electroquímicas.- Corrosión y protección de metales.

Tema 15.- Aplicaciones de las medidas de fuerza electromotriz. Determinación de coeficientes de actividad.- Determinación de índices de transporte.- Determinación de constantes de equilibrio y funciones termodinámicas.- Valoraciones potenciométricas.- Determinación potenciométrica del pH.

IV- Cinética Química

Tema 16.- Velocidad de reacción. Estudio experimental y ecuaciones empíricas de velocidad.- Análisis de los resultados cinéticos.- Reacciones complejas.- Influencia de la temperatura sobre la velocidad de reacción: ecuación de Arrhenius.

Tema 17.- Estudio teórico de la velocidad de reacción. Teoría de colisiones.- Teoría del

Código Seguro de verificación:K+ODXBtN2v1KC+G0dTIYpg==. Permite la verificación de la integridad de una copia de este documento electrónico en la dirección: <https://verificarfirma.uca.es>
 Este documento incorpora firma electrónica reconocida de acuerdo a la Ley 59/2003, de 19 de diciembre, de firma electrónica.

FIRMADO POR	MARIA DEL CARMEN JAREÑO CEPILLO	FECHA	13/07/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	6/8



K+ODXBtN2v1KC+G0dTIYpg==

	<p>complejo activado.- Superficies de energía potencial.- Comparación entre las diferentes teorías.</p> <p>Tema 18.- Mecanismos compuestos. Reacciones en fase gaseosa y en solución.- Reacciones en cadena.- Explosiones. Reacciones en solución: características cinéticas especiales.- Catálisis: características y tipos.</p> <p>Tema 19.- Fotoquímica. Procesos primarios y secundarios.- Diagramas de Jablonsky.- Cinética de procesos fotofísicos y fotoquímicos.- Reacciones fotoquímicas.- Rendimiento cuántico.- Técnicas experimentales.</p>
Actividades	<p>a) Clases de desarrollo teórico. b) Clases prácticas donde se llevarán a cabo la resolución de problemas relacionados con los diversos temas. c) Trabajos académicamente dirigidos para su preparación a través de bibliografía específica o Internet.</p>
Metodología	<p>Una asignatura de estas características, en la que conceptos complejos de muy diferente índole han de ser explicados en un tiempo corto puede resultar problemática y difícil de asimilar por parte de los alumnos. Por esta razón será necesario desarrollar una metodología docente que tenga en cuenta estos aspectos peculiares, y en la que junto con la lección magistral tradicional deberá potenciarse al máximo el papel de los seminarios, las actividades académicamente dirigidas así como el de las tutorías individuales y en grupo. Se utilizará la plataforma Moodle como apoyo a la docencia.</p>
Criterios y sistemas de evaluación	<p>Dado que esta asignatura se encuadra dentro de la experiencia piloto en la</p>

Código Seguro de verificación:K+ODXBtN2v1KC+G0dTIYpg==. Permite la verificación de la integridad de una copia de este documento electrónico en la dirección: <https://verificarfirma.uca.es>
Este documento incorpora firma electrónica reconocida de acuerdo a la Ley 59/2003, de 19 de diciembre, de firma electrónica.


FIRMADO POR	MARIA DEL CARMEN JAREÑO CEPILLO	FECHA	13/07/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	K+ODXBtN2v1KC+G0dTIYpg==	PÁGINA 7/8



K+ODXBtN2v1KC+G0dTIYpg==

	<p>Licenciatura de Química, el sistema de evaluación será: 70% de la nota: Ejercicio escrito en cualquiera de las convocatorias oficiales sobre los temarios teóricos y prácticos de la asignatura. 30% de la nota: Trabajos académicamente dirigidos</p>
Recursos bibliográficos	<ul style="list-style-type: none"> • LEVINE, I.N. : "Fisicoquímica". Vol I y II. McGraw Hill (2004) • ATKINS, P.W.: "Fisicoquímica". Addison-Wesley Iberoamericana. (1991) • LAIDLER, K.J. y MEISER, J.H.: "Fisicoquímica". CECSA (1998) • BERTRÁN, J. y NÚÑEZ, J.: "Química Física". Ariel Ciencia (2002) • ADAMSON, A.W.: "Química Física". Ed. Reverté. (1999) • BARROW, G.M. : "Química Física". Vol I y II. Ed. Reverté. (1988) • CASTELLAN, G.W. : "Fisicoquímica". Fondo Educativo Interamericano. (1997) • MOORE, W.J.: "Química Física". Ed. Urmo. (1978) • DÍAZ, M. y ROIG, A. : "Química Física". Vol I y II. Ed. Alhambra. (1988-89)

Código Seguro de verificación:K+ODXBtN2v1KC+G0dTIYpg==. Permite la verificación de la integridad de una copia de este documento electrónico en la dirección: <https://verificarfirma.uca.es>
Este documento incorpora firma electrónica reconocida de acuerdo a la Ley 59/2003, de 19 de diciembre, de firma electrónica.

FIRMADO POR	MARIA DEL CARMEN JAREÑO CEPILLO	FECHA	13/07/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	K+ODXBtN2v1KC+G0dTIYpg==	PÁGINA 8/8
 K+ODXBtN2v1KC+G0dTIYpg==			