



UNIVERSIDAD DE JAÉN

**TITULACIÓN: LICENCIADO EN QUÍMICA**

**CURSO ACADÉMICO: 2011-2012**

**GUÍA DOCENTE de QUÍMICA FÍSICA I**

**DATOS BÁSICOS DE LA ASIGNATURA**

NOMBRE: QUÍMICA FÍSICA I

CÓDIGO: 3969

AÑO DE PLAN DE ESTUDIOS: 1995  
adaptado en 2000

TIPO (troncal/obligatoria/optativa) : Troncal

Créditos LRU / ECTS  
totales: 6 / 4,6

Créditos LRU/ECTS  
teóricos: 4,5 /3,4

Créditos LRU/ECTS  
prácticos: 1,5 / 1,1

CURSO: 2º

CUATRIMESTRE: 1º

CICLO: 1º

**DATOS BÁSICOS DEL PROFESORADO**

NOMBRE: M<sup>a</sup> Paz Fernández de Liencres de la Torre / Amparo Navarro Rascón

CENTRO/DEPARTAMENTO: Facultad de Ciencias Experimentales / Dpto. Química Física y Analítica

ÁREA: Química Física

Nº DESPACHO:  
B3-133 / B3-124

E-MAIL:  
liencres@ujaen.es  
anavarro@ujaen.es

TLF:  
953 212755 / 953212756

URL WEB:

**DATOS ESPECÍFICOS DE LA ASIGNATURA**

**1. DESCRIPTOR**

Química Cuántica y parte de Termodinámica Química (Termodinámica Estadística).



UNIVERSIDAD DE JAÉN

## **2. SITUACIÓN**

La asignatura se imparte en el primer cuatrimestre del segundo curso de la Titulación de Química.

### **2.1. PRERREQUISITOS:**

A fin de poder abordar con éxito la asignatura se aconseja que el estudiante posea los conocimientos básicos de las asignaturas de “Enlace químico y estructura de la materia” (conceptos sobre estructura atómica y molecular), “Matemáticas”(conceptos sobre complejos, derivadas, integrales, exponenciales) y “Física” de acuerdo con el nivel exigido en el 1er. curso de la Licenciatura de Química.

### **2.2. CONTEXTO DENTRO DE LA TITULACIÓN:**

El conocimiento de las bases fundamentales de la mecánica cuántica para su aplicación a la química junto con los principios básicos de la teoría cinética-molecular y de la termodinámica estadística, permitirá una mejor comprensión de los fundamentos y técnicas espectroscópicas, de las teorías cinéticas moleculares y mecanismos de reacción y, en general, de cualquier otra propiedad macroscópica relacionada con el comportamiento microscópico de sistemas de partículas.

### **2.3. RECOMENDACIONES:**

Es importante la asistencia a clase y la participación en las mismas por lo que se recomienda al alumno que se matricule en aquellas asignaturas cuyo horario sea compatible con el de esta asignatura. Además, es recomendable llevar el trabajo de forma continuada a lo largo del curso y no concentrar el estudio en fechas próximas a la realización de los exámenes. Finalmente, es importante la utilización de los términos y conceptos de la materia de manera adecuada.

## **3. COMPETENCIAS**

### **3.1. COMPETENCIAS TRANSVERSALES/GENÉRICAS:**

1. Desarrollar la capacidad de análisis y síntesis.
2. Saber identificar y resolver problemas.
3. Conocer y comunicar adecuadamente los conceptos y resultados propios de la química.
4. Desarrollar la capacidad crítica para valorar tanto los procedimientos utilizados como su propio trabajo.
5. Capacidad de aplicación de los conocimientos teóricos a la práctica.
6. Aprendizaje autónomo.



UNIVERSIDAD DE JAÉN

### 3.2. **COMPETENCIAS ESPECÍFICAS:**

- **Cognitivas (Saber):**

1. Los principios de la mecánica cuántica y entender la necesidad del planteamiento mecanocuántico.
2. Utilizar de forma apropiada el vocabulario y la terminología específica.
3. El aparato matemático y el formalismo mecanocuántico para su aplicación en el estudio de sistemas sencillos y de la estructura de átomos unieletrónicos.
4. Métodos de aproximación, y sus limitaciones, necesarios para el estudio de sistemas atómicos polieletrónicos y moleculares.
5. Relación entre las propiedades moleculares con la naturaleza del enlace.
6. Fundamentos de la teoría cinético-molecular de los gases.
7. Postulados de la Termodinámica estadística
8. Relacionar las propiedades macroscópicas y las propiedades de átomos y moléculas individuales.

- **Procedimentales/Instrumentales (Saber hacer):**

1. Capacidad para demostrar el conocimiento y comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionadas con los contenidos de la asignatura.
2. Capacidad para aplicar dichos conocimientos a la resolución de problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados.
3. Reconocer y analizar problemas y planear estrategias para solucionarlos.
4. Capacidad para interpretar datos derivados de las observaciones y medidas de tipo químico en términos mecanocuánticos.

- **Actitudinales (Ser):**

1. Mantener una actitud de aprendizaje y mejora.
2. Mostrar flexibilidad al cambio
3. Trabajar con responsabilidad.

### 4. **OBJETIVOS**

1. Lograr que el alumno conozca y valore la utilidad de la mecánica cuántica y de los métodos de aproximación para el estudio cuantitativo de sistemas atómicos y moleculares.
2. Dar una formación básica al alumno sobre el comportamiento de los sistemas de partículas desde la perspectiva de la teoría cinética de los gases y de la termodinámica estadística.
3. Desarrollar en el alumno la capacidad para plantear y resolver problemas, así como para interpretar los resultados obtenidos.



UNIVERSIDAD DE JAÉN

## 5. METODOLOGÍA

**NÚMERO DE HORAS DE TRABAJO DEL ALUMNO: 115**

### **PRIMER CUATRIMESTRE:**

Nº de Horas: 115

- Clases Teóricas: 32
- Clases Prácticas: 11
- Exposiciones y Seminarios:
- Tutorías Especializadas (presenciales o virtuales): 12
  - A) Colectivas: 12
  - B) Individuales:
- Realización de Actividades Académicas Dirigidas: 6
  - A) Con presencia del profesor:
  - B) Sin presencia del profesor: 6
- Otro Trabajo Personal Autónomo: 54
  - A) Horas de estudio: 48(T)+ 6 (P)
  - B) Preparación de Trabajo Personal:
  - C) ...
- Realización de Exámenes: 4
  - A) Examen escrito: 4
  - B) Exámenes orales (control del Trabajo Personal):



UNIVERSIDAD DE JAÉN

**6. TÉCNICAS DOCENTES** (señale con una X las técnicas que va a utilizar en el desarrollo de su asignatura. Puede señalar más de una. También puede sustituirlas por otras):

|                                    |                        |                                     |
|------------------------------------|------------------------|-------------------------------------|
| Sesiones académicas teóricas<br>X  | Exposición y debate:   | Tutorías especializadas:<br>X       |
| Sesiones académicas prácticas<br>X | Visitas y excursiones: | Controles de lecturas obligatorias: |

Otros (especificar):

### DESARROLLO Y JUSTIFICACIÓN:

**7. BLOQUES TEMÁTICOS** (dividir el temario en grandes bloques temáticos; no hay número mínimo ni máximo)

Postulados de Mecánica Cuántica y aplicación a sistemas sencillos.  
Estructura Atómica.  
Estructura Molecular.  
Teoría cinética del gas ideal.  
Termodinámica Estadística.

### 8. BIBLIOGRAFÍA

#### 8.1 GENERAL

- I.N. Levine, *Química Cuántica* 5ª Ed., Prentice Hall, 2001.
- J. Bertrán, V. Branchadell, M. Moreno y M. Sodupe, *Química Cuántica*, Síntesis, 2000.
- P.W. Atkins y R.S. Friedman, *Molecular Quantum Mechanics* 3ª Ed., Oxford University Press, 1997.
- I.N. Levine, *Fisicoquímica* 5ª Ed., McGraw Hill, 2004.
- M. Díaz Peña y A. Roig Muntaner, *Química Física*, Alhambra, 1978.
- T. Engel y P.Reid, *Química Física*, Pearson Education, Madrid, 2006.

#### 8.2 ESPECÍFICA (con remisiones concretas, en lo posible)

- J.N. Murrell, S.F.A. Kettle, J.M. Tedder, *The Chemical Bond* 2ªEd., Wiley, 1987.
- F.L. Pilar, *Elementary Quantum Chemistry* 2ªEd., McGraw Hill, 1990.
- J.P. Lowe, *Quantum Chemistry* 2ª Ed., Academic Press, 1981.
- D.A. McQuarrie, *Quantum Chemistry*, University Science Books, 1983.
- J. Bertrán Rusca y J. Núñez Delgado (coords.), *Química Física (Vol I)* Ariel Ciencia, 2002.

**9. TÉCNICAS DE EVALUACIÓN** (enumerar, tomando como referencia el catálogo de la correspondiente Guía Común)

- Examen sobre los contenidos teóricos y de problemas.

**Criterios de evaluación y calificación** (referidos a las competencias trabajadas durante el curso):

- El examen final de la asignatura supondrá el 100% de la nota final (Teoría: 2/3 de la calificación y problemas: 1/3 de la calificación).



UNIVERSIDAD DE JAÉN

## **11. TEMARIO DESARROLLADO** (con indicación de las competencias que se van a trabajar en cada tema)

Nota: este apartado se puede integrar con el apartado 7 (BLOQUES TEMÁTICOS)

### **TEMA 1.- POSTULADOS DE LA MECÁNICA CUÁNTICA**

Operadores y observables en mecánica cuántica. Álgebra de operadores. Función de estado. Postulados de la mecánica cuántica. Ecuación de Schrödinger estacionaria. Estados estacionarios.

Competencias: Los principios de la mecánica cuántica y entender la necesidad del planteamiento mecanocuántico. Utilizar de forma apropiada el vocabulario y la terminología específica.

### **TEMA 2.- APLICACIÓN DE LA MECÁNICA CUÁNTICA A SISTEMAS SENCILLOS**

La partícula libre y en la caja de potencial. Efecto túnel mecano-cuántico. El oscilador armónico en una dimensión. Momento angular. Operadores ascendente y descendente para el momento angular. El rotor rígido de dos partículas.

Competencias: El aparato matemático y el formalismo mecanocuántico para su aplicación en el estudio de sistemas sencillos. Utilizar de forma apropiada el vocabulario y la terminología específica.

### **TEMA 3.- ATOMOS HIDROGENOIDES**

El movimiento en un campo central. Ecuación de ondas y estados estacionarios para átomos hidrogenoides: Resolución de la ecuación radial. Degeneración. La función radial. La función angular. Orbital atómico: Representación. Experimento de Stern-Gerlach. El espín electrónico.

Competencias: El aparato matemático y el formalismo mecanocuántico para su aplicación en el estudio de la estructura de átomos unielectrónicos. Utilizar de forma apropiada el vocabulario y la terminología específica.

### **TEMA 4.- MÉTODOS DE APROXIMACIÓN**

Método de perturbaciones independientes del tiempo para niveles no degenerados.- Método de variaciones lineales. Aplicación al átomo de helio.

Competencias: Métodos de aproximación, y sus limitaciones, necesarios para el estudio de sistemas atómicos polielectrónicos y moleculares. Utilizar de forma apropiada el vocabulario y la terminología específica.

### **TEMA 5.- ÁTOMOS POLIELECTRÓNICOS**

Método del campo autoconsistente de Hartree. Orbitales aproximados de Slater.- Principio de exclusión de Pauli. Determinantes de Slater. Método Hartree-Fock. Ecuaciones de Roothaan. Momento angular orbital y de spin. Acoplamiento spin-orbita. Momento angular total. Espectros atómicos.

Competencias: Métodos de aproximación, y sus limitaciones, necesarios para el estudio de sistemas atómicos polielectrónicos. Utilizar de forma apropiada el vocabulario y la terminología específica.



UNIVERSIDAD DE JAÉN

#### TEMA 6.- ESTRUCTURA ELECTRÓNICA DE MOLÉCULAS DIATÓMICAS.

##### TEORÍA OM

El hamiltoniano molecular. Aproximación de Born-Oppenheimer. Método OM-CLOA. Aplicación a la molécula ión de hidrógeno. Refinamientos al método MO-CLOA sencillo. Otras moléculas diatómicas homonucleares. Orden de enlace. Moléculas diatómicas heteronucleares. Momentos dipolares. El momento angular en moléculas diatómicas. Términos espectroscópicos.

Competencias: Relación entre las propiedades moleculares con la naturaleza del enlace. Utilizar de forma apropiada el vocabulario y la terminología específica.

#### TEMA 7.- ESTRUCTURA ELECTRÓNICA DE MOLÉCULAS DIATÓMICAS.

##### TEORÍA EV

La molécula de hidrógeno en el contexto de la teoría EV. Mejoras sobre el modelo Heitler-London. Otras moléculas diatómicas homonucleares. Moléculas diatómicas heteronucleares. Momentos dipolares y electronegatividades. Introducción de las coordenadas de spin: Comparación entre los resultados OM y EV.

Competencias: Métodos de aproximación, y sus limitaciones, necesarios para el estudio de sistemas moleculares. Relación entre las propiedades moleculares con la naturaleza del enlace.

#### TEMA 8.- MOLÉCULAS POLIATÓMICAS CON ENLACES LOCALIZADOS

Descripción del enlace en moléculas poliatómicas según la teoría OM. Estudio de las moléculas de agua y amoniacó. Orbitales moleculares localizados: Aproximación de la valencia dirigida. Orbitales moleculares y geometría molecular. Diagramas de Walsh. Descripción del enlace en moléculas poliatómicas según la teoría EV: Aproximación del apareamiento perfecto. Teoría EV extendida: Hibridación de orbitales.

Competencias: Métodos de aproximación, y sus limitaciones, necesarios para el estudio de sistemas moleculares. Relación entre las propiedades moleculares con la naturaleza del enlace.

#### TEMA 9.- EL ENLACE EN MOLÉCULAS CONJUGADAS

Descripción EV del enlace en moléculas conjugadas.- Descripción OM del enlace en moléculas conjugadas: Aproximación Hückel. Índices de reactividad. Efectos de sustituyentes y heteroátomos. Correlación entre los parámetros de la teoría de Hückel y propiedades moleculares experimentales.

Competencias: Métodos de aproximación, y sus limitaciones, necesarios para el estudio de sistemas moleculares. Relación entre las propiedades moleculares con la naturaleza del enlace.

#### TEMA 10.- TEORÍA CINÉTICA DEL GAS IDEAL

Ley de distribución de velocidades de Maxwell para un gas ideal. Tipos de velocidades. Ley de distribución de energías: Principio de equipartición. Difusión de gases. Ley de Graham. Frecuencia de colisión y recorrido libre medio.

Competencias: Fundamentos de la teoría cinético-molecular de los gases. Utilizar de forma apropiada el vocabulario y la terminología específica.



UNIVERSIDAD DE JAÉN

### TEMA 11.- TERMODINÁMICA ESTADÍSTICA I

Estados cuánticos, complexiones y distribuciones. Postulados de la Mecánica estadística. Modelos estadísticos: Bose-Einstein, Fermi-Dirac, Maxwell-Boltzmann. Comparación entre los tres modelos: Modelo de Maxwell-Boltzmann corregido. Distribución más probable y su variación con la temperatura.

Competencias: Postulados de la Termodinámica Estadística. Utilizar de forma apropiada el vocabulario y la terminología específica.

### TEMA 12.- TERMODINÁMICA ESTADÍSTICA II.

Función de partición molecular para un sistema ideal.- Función de partición nuclear y electrónica.- Función de partición traslacional, rotacional y vibracional.- Cálculo estadístico de magnitudes termodinámicas.- Funciones de partición y equilibrio químico.

Competencias: Relacionar las propiedades macroscópicas con las propiedades de átomos y moléculas individuales. Utilizar de forma apropiada el vocabulario y la terminología específica.