

| Titulación     | Tipo | Curso |
|----------------|------|-------|
| 2500097 Física | FB   | 1     |

## Contacto

Nombre: Miquel Moreno Ferrer

Correo electrónico: miquel.moreno@uab.cat

## Equipo docente

Miquel Moreno Ferrer

Mireia Garcia Viloca

## Idiomas de los grupos

Puede consultar esta información al [final](#) del documento.

## Prerrequisitos

A pesar de que no existan prerrequisitos oficiales, es muy aconsejable que el estudiante haya cursado química durante el bachillerato.

## Objetivos y contextualización

El objetivo general de la asignatura es el de despertar en el estudiante interés por los fenómenos de la naturaleza que son del ámbito de la química, es decir: el estudio de la materia desde el punto de vista atómico, y la conciencia de que este estudio se basa en las leyes generales del mundo físico.

Al mismo tiempo, también se pretende que los conocimientos adquiridos permitan ampliar el campo de visión, y por lo tanto, las posibilidades laborales.

Objetivos parciales de la asignatura son:

- 1) Comprender el comportamiento "anómalo" de los electrones que lleva a los conceptos de energía cuantizada y orbitales atómicos.
- 2) Entender el enlace químico y cómo la estructura molecular nos permite racionalizar las interacciones intermoleculares que conducen a la existencia de diferentes estados de la materia.

## Competencias

- Comunicar eficazmente información compleja de forma clara y concisa, ya sea oralmente, por escrito o mediante TIC, y en presencia de público, tanto a audiencias especializadas como generales.
- Desarrollar estrategias de análisis, síntesis y comunicación que permitan transmitir los conceptos de la Física en entornos educativos y divulgativos.
- Desarrollar la capacidad de análisis y síntesis que permita adquirir conocimientos y habilidades en campos distintos al de la Física y aplicar a los mismos las competencias propias del Grado en Física, aportando propuestas innovadoras y competitivas.
- Razonar críticamente, poseer capacidad analítica, usar correctamente el lenguaje técnico, y elaborar argumentos lógicos.
- Trabajar autónomamente, usar la propia iniciativa, ser capaz de organizarse para alcanzar unos resultados, planear y ejecutar un proyecto.

## Resultados de aprendizaje

1. Aplicar los conocimientos sobre la estructura de la materia para explicar las propiedades y la reactividad de las sustancias simples y complejas.
2. Aplicar los principios de la termodinámica y la cinética en los procesos químicos.
3. Comunicar eficazmente información compleja de forma clara y concisa, ya sea oralmente, por escrito o mediante TIC, y en presencia de público, tanto a audiencias especializadas como generales.
4. Exponer y discutir con los compañeros las propias ideas sobre la naturaleza de los procesos químicos estudiados.
5. Gestionar la información, la planificación y organización del trabajo individual y del trabajo cooperativo para resolver problemas químicos.
6. Identificar diferentes tipos de reacciones químicas y determinar las concentraciones de las sustancias que participan en el equilibrio.
7. Identificar los factores que determinan la velocidad de las reacciones químicas.
8. Razonar críticamente, poseer capacidad analítica, usar correctamente el lenguaje técnico, y elaborar argumentos lógicos.
9. Trabajar autónomamente, usar la propia iniciativa, ser capaz de organizarse para alcanzar unos resultados, planear y ejecutar un proyecto.

## Contenido

### Lección 1 Antecedentes de la mecánica cuántica.

Ondas y partículas. Radiación electromagnética. Radiación del cuerpo negro. Efecto fotoeléctrico. Dualidad onda-partícula. Difracción de electrones. Principio de incertidumbre. Ecuación de Schrödinger. Interpretación probabilística de la función de onda. Estados de energía.

### Lección 2. Estructura atómica.

Resolución de la ecuación de Schrödinger para el caso modelo de partícula en una caja. Solución de la ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno. Números cuánticos y orbitales. Significado físico de los orbitales. Análisis matemático. Experimento de Stern-Gerlach: espín electrónico. Átomos polieletrónicos. Principio de antisimetría. Cálculo de los orbitales de átomos polieletrónicos. Apantallamiento. Configuraciones electrónicas. Tabla periódica. Propiedades periódicas: Radios atómicos, energía de ionización y afinidad electrónica. Concepto de electronegatividad.

### Lección 3. Estructura molecular I.

Orbitales moleculares. Método CLOA. Estudio cualitativo de moléculas diatómicas. Extensión a sistemas poliatómicos. Diagramas de Walsh. El enlace metálico. Teoría de bandas. Métodos cuantitativos para obtener los orbitales moleculares. Química computacional.

#### Lección 4. Estructura molecular II.

Enlace covalente: teoría de Lewis. Fuerzas de enlace. Polaridad de los enlaces y electronegatividad. Ácidos y bases de Lewis. Geometría molecular (VSEPR). Momento dipolar.

#### Lección 5. Fuerzas intermoleculares.

Interacciones entre moléculas cargadas (iones). Enlace iónico. Interacciones entre moléculas polares. Interacciones entre moléculas polares y no polares: momento dipolar inducido. Interacciones entre moléculas no polares. Fuerzas de dispersión de London. Un fenómeno no del todo explicado: el enlace de hidrógeno.

#### Lección 6. Estructura de los sólidos.

Estados de agregación y fuerzas intermoleculares. Tipos de sólidos: sólidos covalentes, sólidos iónicos, sólidos metálicos y sólidos moleculares. Estructuras cristalinas compactas y no compactas. Celda unidad. Propiedades físicas de los sólidos. Sólidos iónicos: Energía reticular y ciclo de Born-Haber.

### Actividades formativas y Metodología

| Título                          | Horas | ECTS | Resultados de aprendizaje |
|---------------------------------|-------|------|---------------------------|
| Tipo: Dirigidas                 |       |      |                           |
| Clases de problemas             | 15    | 0,6  | 1, 2, 7, 8                |
| Clases de teoría                | 30    | 1,2  | 6, 7, 8                   |
| Tipo: Supervisadas              |       |      |                           |
| Preparación de temas de teoría  | 6     | 0,24 | 5, 4                      |
| Tipo: Autónomas                 |       |      |                           |
| Estudio de fundamentos teóricos | 50,5  | 2,02 | 5                         |
| Resolución de problemas         | 39,5  | 1,58 | 1, 2, 6, 7, 5, 8          |

El centro del proceso de aprendizaje es el trabajo del alumno. El estudiante aprende trabajando, siendo la misión del profesorado ayudarlo en esta labor (1) suministrándole la información o mostrándole las fuentes donde se pueden conseguir y (2) acompañando sus pasos de forma que el proceso de aprendizaje pueda realizarse eficazmente. En línea con estas ideas, y de acuerdo con los objetivos de la asignatura, el desarrollo del curso se basa en las siguientes actividades:

#### Clases teóricas:

El alumno adquiere los conocimientos científico-técnicos propios de la asignatura asistiendo a las clases y participando en la construcción del conocimiento propio. En estas, se alternarán las explicaciones por parte del profesor con el planteamiento de cuestiones y discusión entre los alumnos. Para complementarlas es necesario el estudio personal de los temas tratados. Durante las últimas clases se reservarán 15 minutos para que los alumnos puedan responder a la encuesta sobre la asignatura.

#### Clases de problemas y ejercicios:

En estas sesiones, con una doble misión, por un lado se trabajan los conceptos científico-técnicos

previamente trabajados en las clases teóricas con la finalidad de completar su comprensión y profundizar en ellos básicamente a partir de la resolución de problemas. Por otra parte, a partir de la discusión crítica de los ejercicios realizados, estas clases son el fórum natural en el cual discutir en común el desarrollo del trabajo realizado por el alumno aportando los conocimientos necesarios para llevarlo a cabo, o indicando donde y cómo se pueden adquirir. La misión de las clases de problemas es la de hacer de puente entre las clases teóricas y el trabajo autónomo, promoviendo la capacidad de análisis, el razonamiento crítico, y la capacidad de resolución de problemas.

Nota: se reservarán 15 minutos de una clase dentro del calendario establecido por el centro o por la titulación para que el alumnado rellene las encuestas de evaluación de la actuación del profesorado y de evaluación de la asignatura o módulo.

## Evaluación

### Actividades de evaluación continuada

| Título             | Peso | Horas | ECTS | Resultados de aprendizaje |
|--------------------|------|-------|------|---------------------------|
| Evidencias         | 10%  | 0     | 0    | 3, 5, 4, 8, 9             |
| Examen final       | 90%  | 3     | 0,12 | 1, 2, 8                   |
| Exámenes parciales | 90%  | 6     | 0,24 | 1, 2, 6, 7                |

En esta asignatura se realizará una evaluación continuada. La nota final estará distribuida entre los siguientes conceptos:

- Evidencias 10% (no recuperable)
- Exámenes parciales 90 % (2 en total)

Para aprobar la asignatura se realizará la media ponderada de los dos exámenes parciales y de las evidencias a entregar y la nota obtenida ha de ser como mínimo de 5.0. Adicionalmente es preciso obtener una nota mínima de 4 en cada uno de los dos parciales y haber presentado todos los trabajos.

- Examen final de recuperación 90%. Optativo y que comprende toda la materia de la asignatura con el objetivo de recuperar la asignatura o aumentar la nota final. La nota del examen final sustituirá la nota obtenida en el conjunto de los dos parciales. Es necesario indicar que sólo se puede recuperar el 90% de la asignatura, correspondiente a la nota de los dos parciales. No se podrá recuperar la nota de los trabajos a entregar. Para presentarse al examen final es preciso que el alumno se haya presentado a un mínimo de 1 examen parcial y haya entregado todos los trabajos.

Los no-evaluados

Se considerará que un estudiante obtendrá la calificación de No evaluable si no se ha presentado a todos los exámenes parciales ni al examen final.

### EVALUACIÓN ÚNICA

El alumnado que se haya acogido a la modalidad de evaluación única deberá realizar una única prueba final que consistirá en dos partes: Un examen donde se valorarán los conocimientos teóricos adquiridos por el alumno y unos ejercicios parecidos a los propuestos como evidencias a los alumnos de evaluación continua donde se valorará la capacidad de conectar los conocimientos de teoría con su aplicación a casos concretos.

Esta prueba final se llevará a cabo el mismo día, hora y lugar que las pruebas del segundo parcial de la modalidad de evaluación continuada. La calificación del estudiante será la que se obtenga de esta prueba final.

Si la nota es inferior a 5 sobre 10, el estudiante tiene otra oportunidad de superar la asignatura mediante el examen de recuperación que se celebrará en la fecha que fije la coordinación de titulación.

## Bibliografía

### Bibliografía más relevante

I.N. LEVINE, *Physical Chemistry* 6th Edition, McGraw Hill, 2009. ISBN: 978-0072538625

P. W. ATKINS *Physical Chemistry*, 8th Edition, Oxford University Press (2006) ISBN: 0-19-879285-9

J. CASABÓ, *Estructura atómica y enlace químico*, Ed. Reverté. 1997. ISBN: 84-291-7189-4

F. CENTELLES, E. BRILLAS, X. DOMÈNECH, R. M. BASTIDA, *Fonaments d'estructura atòmica i de l'enllaç químic. Publicacions de la Universitat de Barcelona-Barcanova*. 2002. ISBN: 9788475338064

J. M. COSTA, J. M. LLUCH, J. J. PÉREZ, *Química. Estructura de la matèria. Enciclopèdia Catalana. Biblioteca Universitària*. 1994. ISBN: 13: 9788477395164.

P. A. COX, *Introduction to quantum theory and atomic structure, Oxford chemistry primers*. 1998. ISBN: 0-19-855916-X

H. B. GRAY, *Chemical bonds: an introduction to atomic and molecular structure, University Science Books*. 1994. ISBN: 0-935702-35-0

En general, cualquier libro de química física general es adecuado para esta asignatura básica

## Software

En esta asignatura no se usará ningún programa en particular

## Lista de idiomas

| Nombre                   | Grupo | Idioma  | Semestre            | Turno        |
|--------------------------|-------|---------|---------------------|--------------|
| (PAUL) Prácticas de aula | 1     | Catalán | primer cuatrimestre | mañana-mixto |
| (PAUL) Prácticas de aula | 2     | Catalán | primer cuatrimestre | mañana-mixto |
| (TE) Teoría              | 1     | Catalán | primer cuatrimestre | mañana-mixto |
| (TE) Teoría              | 2     | Catalán | primer cuatrimestre | mañana-mixto |