



Grado en Química **27213 - Química física II**

Guía docente para el curso 2012 - 2013

Curso: 3, Semestre: 0, Créditos: 11.0

Información básica

Profesores

- **Sofía Teresa Blanco Ariño** sblanco@unizar.es
- **Carlos Enrique Lafuente Dios** celadi@unizar.es
- **Ignacio Gascón Sabaté** igascon@unizar.es
- **Victoriano Polo Ortiz** vipolo@unizar.es
- **María Inmaculada Velasco Albillos** curra@unizar.es
- **María Asunción Gallardo Jiménez** qoqf@unizar.es
- **Javier Fernández López** javierf@unizar.es
- **Santiago Martín Solans** smartins@unizar.es

Recomendaciones para cursar esta asignatura

Se recomienda:

- Tener aprobadas, al menos, las asignaturas de 1er curso: Química General, Introducción al Laboratorio Químico, Física y Matemáticas.
- Tener aprobadas, al menos, las asignaturas de 2º curso: Química Física I y Laboratorio de Química.
- Realizar un trabajo regular y continuado a lo largo del curso, participando activamente en las clases y tutorías, y resolviendo los problemas y casos propuestos.
- Acostumbrarse a consultar libros específicos relacionados con la asignatura.

Actividades y fechas clave de la asignatura

El calendario correspondiente al curso así como las fechas y horarios de clases y exámenes de la asignatura se pueden consultar en la siguiente página de Internet: <http://ciencias.unizar.es/web/horarios.do>

Las fechas correspondientes a los controles, seminarios y prácticas se indicarán a lo largo del curso. En el apartado "Evaluación" se indican las actividades de evaluación y su distribución temporal aproximada.

La asignatura se estructura en cuatro partes o bloques:

1. Química Cuántica: Fundamentos y estructura atómica. Teoría-problemas + 1 práctica de ordenador (a realizar entre noviembre y febrero); ocupa el primer semestre.

2. Química Cuántica: Enlace químico. 4 prácticas de ordenador + su explicación teórica; al principio del 2º semestre.
3. Química Física de Superficies. Teoría-problemas, 2º semestre.
4. Prácticas de laboratorio de Química Física de Superficies. 2º semestre.

Requisitos

Requisitos para cursar esta asignatura

Para cursar Química Física II es preceptivo haber cursado Química Física I

Inicio

Resultados de aprendizaje que definen la asignatura

El estudiante, para superar esta asignatura, deberá demostrar los siguientes resultados...

- 1:**
Efectúa análisis, síntesis, razonamiento crítico.
- 2:**
Ha adquirido espíritu emprendedor y capacidad para aprendizaje autónomo y para el trabajo en grupo, y resolución de problemas.
- 3:**
Distingue entre enfoque macroscópico y microscópico.
- 4:**
Conoce el significado, maneja con soltura y relaciona las magnitudes quimicofísicas incluidas en el programa de la asignatura.
- 5:**
Utiliza las herramientas matemáticas y físicas que exige el tratamiento, desde el punto de vista cuántico, de problemas químicos a nivel atómico y molecular.
- 6:**
Sabe resolver problemas cuánticos básicos y aplicar los resultados a la interpretación del comportamiento de sistemas más complicados.
- 7:**
Maneja los modelos y teorías que describen el comportamiento quimicofísico de las interfases.
- 8:**
Obtiene los parámetros cinéticos a partir de datos experimentales para procesos que tienen lugar en las interfases.

Introducción

Breve presentación de la asignatura

Asignatura Obligatoria del Módulo Fundamental con 11 ECTS de los que 6 corresponden a conocimientos teóricos, 2 a problemas y seminarios y 3 a Prácticas de laboratorio/ordenador. Tiene como función principal proporcionar a los alumnos una formación básica y general en campos fundamentales de la Química Física como la Química Cuántica y la Química Física de Superficies. Los conocimientos adquiridos serán de gran importancia para comprender las bases de muchos procesos físicos y químicos y aplicaciones de los mismos que serán presentados en otras asignaturas de Química del Grado.

Contexto y competencias

Sentido, contexto, relevancia y objetivos generales de la asignatura

La asignatura y sus resultados previstos responden a los siguientes planteamientos y objetivos:

1. Conocer los fundamentos y principios esenciales del método mecano-cuántico y aplicarlos al estudio de problemas sencillos.
2. Conocer los conceptos y principios esenciales de la Química Física de Superficies y aplicarlos al estudio de sistemas de interés en Química.
3. Aplicar los conocimientos teóricos a la resolución de cuestiones y problemas que plantean los fenómenos químicos desde el punto de vista estructural, tanto a nivel atómico como molecular.
4. Aplicar los conocimientos teóricos al estudio de los procesos y reacciones que tienen lugar en las interfases.
5. Introducirse en el manejo de programas de cálculo con ordenador para el estudio químico cuántico de átomos y moléculas.
6. Profundizar en el manejo de técnicas experimentales de interés en Química Física así como en los correspondientes tratamientos de datos.
7. Aplicar los conocimientos teóricos a la resolución de cuestiones y problemas, utilizando adecuadamente los sistemas de unidades y analizando e interpretando físicamente los resultados obtenidos.
8. Expresar los conceptos con la precisión requerida en el ámbito científico y ser capaz de establecer relaciones entre los distintos conceptos.
9. Obtener bases sólidas para poder continuar con éxito el aprendizaje en asignaturas posteriores y en aspectos más avanzados de la Química Física.
10. Proporcionar una sólida base (conocimientos y habilidades) que le capacite para continuar los estudios en áreas especializadas, o en el ejercicio de su profesión.

Contexto y sentido de la asignatura en la titulación

La asignatura se ubica en el Módulo Fundamental ya que trata de contenidos básicos de una de las partes fundamentales de la Química Física, como es la Química Cuántica y de otros capítulos importantes no considerados anteriormente en el Grado, como Superficies, Catálisis Heterogénea, Catálisis Enzimática y Cinética Electrónica, que serán de gran importancia en el desarrollo de otras asignaturas del Grado tanto de Química Física como de otras Áreas.

Al superar la asignatura, el estudiante será más competente para...

- 1: Reconocer la importancia de la Química Física en el contexto de la Química y la Ciencia en general y su impacto social.
- 2: Utilizar tablas y gráficos de datos quimicofísicos y las leyes o ecuaciones de la Química con sentido crítico, considerando su aplicabilidad y adecuación a los problemas químicos concretos.
- 3: Ejercer crítica y autocrítica sobre la forma de obtención (métodos, fuentes...) de resultados, y sobre los propios resultados obtenidos.
- 4: Conocer y comprender los conceptos fundamentales de la Química Cuántica y cómo, a partir de ellos, se puede obtener información sobre la estructura atómica y molecular.
- 5: Saber racionalizar tanto las propiedades como el comportamiento de la materia en función de la estructura electrónica del sistema.
- 6:

Manejar aplicaciones informáticas para un tratamiento mecano-cuántico de sistemas químicos sencillos.

- 7:** Conocer y manejar con rigor tanto los aspectos fundamentales como las propiedades de las interfases líquido-gas.
- 8:** Distinguir los distintos procesos de adsorción en una interfase sólido-gas así como sus implicaciones en el fenómeno de catálisis heterogénea y su cinética.
- 9:** Manejar datos de velocidad en procesos de catálisis enzimática, obtener los parámetros cinéticos y ser capaz de interpretar los resultados.
- 9:** Entender las peculiaridades de la interfase electrificada y analizar los aspectos más importantes de las reacciones electroquímicas.
- 10:** Aplicar técnicas quimiofísicas en el laboratorio.

Importancia de los resultados de aprendizaje que se obtienen en la asignatura:

Mediante ellos el alumno:

1. Comprenderá y manejará la terminología básica propia de la Química Cuántica y de la Química Física de Superficies.
2. Será capaz de resolver problemas sencillos utilizando el método mecano-cuántico.
3. Será capaz de explicar la estructura de la materia a nivel atómico y conocerá la interpretación cuántica del enlace químico.
4. Manejará programas de cálculo con ordenador para el estudio químico cuántico de moléculas.
5. Será capaz de explicar de manera comprensible los aspectos termodinámicos y cinéticos de procesos y reacciones que tienen lugar en las interfases.
6. Será capaz de utilizar técnicas quimiofísicas relacionadas con los contenidos teóricos.

Evaluación

Actividades de evaluación

El estudiante deberá demostrar que ha alcanzado los resultados de aprendizaje previstos mediante las siguientes actividades de evaluación

- 1:** El calendario de las actividades de evaluación será el siguiente:
- 1.-Control de Fundamentos de la Química Cuántica (Calificación C)** a realizar en Noviembre. No elimina materia.
 - 2.-Examen de Química Cuántica (Fundamentos y Estructura Atómica), (Calificación B1).** A realizar al final del 1er semestre, en el periodo habilitado por la Facultad (enero-febrero). Incluye la materia vista en el primer semestre y elimina materia. Es necesario haber realizado la práctica de ordenador de este semestre para presentarse a este examen.
 - 3.-Examen de Química Cuántica (Enlace químico), (Calificación P1).** Incluye las 4 prácticas de ordenador relativas a moléculas + su explicación teórica. A realizar en abril (aproximadamente), al terminar la prácticas de ordenador. Elimina materia. Es necesario haber realizado las 4 prácticas de ordenador para presentarse a este examen.
 - 4.-Evaluación de las prácticas de laboratorio mediante informes/cuestionarios (Calificación P2)** a realizar una vez terminadas las prácticas (mayo). Elimina materia. Es necesario haber realizado las prácticas de

laboratorio y haber entregado los informes/cuestionarios para acceder a esta evaluación.

El control (prueba 1) no elimina materia, entrando ésta también en el examen (2), pero puede servir para subir nota.

Las pruebas 2, 3 y 4 eliminan materia y sus resultados se guardan hasta la convocatoria de septiembre.

En la convocatoria oficial de junio el estudiante debe presentarse a aquellas partes de la asignaturas que no tenga aprobadas, o bien a una prueba completa de la asignatura (a su elección). Nótese que aún no se ha evaluado la parte de teoría-problemas correspondiente a Química Física de Superficies (2º semestre, calificación B2)

5.-Convocatoria oficial de junio (establecida por la Facultad). En esta prueba el alumno optará por una de las siguientes opciones:

5.1.-Examen de aquellos bloques de la asignatura que no se tenga superados. Quien haya superado las pruebas de evaluación 2, 3 y 4 tendrá que examinarse solo de la parte de Química Física de Superficies, que aún no ha sido evaluada.

5.2.-Examen global de toda la asignatura (que estará formado por los mismos 4 bloques).

6.-Convocatoria oficial de septiembre (establecida por la Facultad). En esta prueba el alumno optará por una de las siguientes opciones:

6.1.-Examen de aquellos bloques de la asignatura que no tenga superados.

6.2.-Examen global de toda la asignatura (que estará formado por los mismos 4 bloques).

2:

Todos los bloques aprobados (≥ 5) eliminan materia y se guardan hasta septiembre. Para aprobar la asignatura, bien sea por bloques o mediante examen global, es necesario aprobar todos los bloques de forma independiente, si bien se puede compensar entre ellos con una calificación individual mínima de 4,5 sobre 10, siempre que la nota final sea como mínimo 5,0 sobre 10.

La nota final será el mayor valor de los dos siguientes:

$$\text{Nota} = C \times 0,05 + B1 \times 0,455 + P1 \times 0,1625 + P2 \times 0,0875 + B2 \times 0,245$$

$$\text{Nota} = B1 \times 0,505 + P1 \times 0,1625 + P2 \times 0,0875 + B2 \times 0,245$$

3:

El número de convocatorias oficiales de examen a las que la matrícula da derecho (2 por matrícula) así como el consumo de dichas convocatorias se ajustará a la Normativa de Permanencia en Estudios de Grado (http://www.unizar.es/sg/doc/BOUZ10-10_001.pdf) y Reglamento de Normas de Evaluación del Aprendizaje. A este último reglamento, también se ajustará el sistema de calificación, y de acuerdo a la misma se hará público el horario, lugar y fecha en que se celebrará la revisión al publicar las calificaciones. Dicha normativa puede consultarse en:

<http://wzar.unizar.es/servicios/coord/norma/evalu/evalu.html>

Actividades y recursos

Presentación metodológica general

El proceso de aprendizaje que se ha diseñado para esta asignatura se basa en lo siguiente:

El proceso de aprendizaje constará de:

Actividad formativa 1: Adquisición de conocimientos teóricos de Química Física (6 ECTS) en clases magistrales participativas en grupo grande.

Actividad Formativa 2: Clases de resolución de problemas y seminarios (2 ECTS) donde los alumnos bajo la supervisión del profesor trabajarán en grupos pequeños, participando activamente en estas actividades.

Actividad Formativa 3: Clases prácticas de ordenador (2 ECTS) donde los alumnos trabajarán individualmente (como norma general) en temas de Química Cuántica.

Actividad Formativa 4: Clases prácticas de Laboratorio (1 ECTS) donde los alumnos realizarán, bajo la supervisión del profesor, aplicaciones prácticas de la parte de la asignatura Química Física de Superficies. El trabajo se organizará, como norma general, por grupos de dos alumnos.

Actividades de aprendizaje programadas (Se incluye programa)

El programa que se ofrece al estudiante para ayudarle a lograr los resultados previstos comprende las siguientes actividades...

1: Química Cuántica (Fundamentos y Estructura atómica): 46 horas de teoría y problemas + 4 horas de prácticas de ordenador.

Los orígenes de la Mecánica Cuántica. Radiación y materia: el cuerpo negro. Efecto fotoeléctrico. Hipótesis de De Broglie. Primeros modelos atómicos: Rutherford, Bohr y Sommerfeld. Mecánica Cuántica. Introducción. Operadores. Funciones propias y valores propios. Postulados de la Mecánica Cuántica. Formas de trabajo con sistemas conservativos en Mecánica Cuántica. Consecuencias de los postulados de la Mecánica Cuántica. Desarrollo en serie de la función Ψ : medida y superposición de estados. Sistemas de partículas independientes y separación de variables. Funciones propias de dos operadores: conocimiento simultáneo y exacto de dos propiedades físicas. Principio de incertidumbre. Aplicaciones de la Mecánica Cuántica. La partícula en el pozo monodimensional. La partícula en el pozo tridimensional. La partícula libre. El efecto túnel. El oscilador armónico. El momento angular. El rotor rígido. El átomo de hidrógeno. Resolución de la ecuación de Schrödinger. Orbitales atómicos. Momento intrínseco o de spin. Estructura fina del espectro del átomo de hidrógeno. Métodos aproximados para resolver la ecuación de Schrödinger. Fundamentos de los métodos de perturbaciones y variaciones. Aplicación de ambos métodos al átomo de helio. Comparación de ambos. Átomos polieletrónicos. Método del campo autoconistente. El principio de exclusión de Pauli. Determinantes de Slater. El momento angular en átomos polieletrónicos. Acoplamientos. Términos energéticos. Acción de un campo magnético sobre las líneas espectrales. Efectos Zeeman normal y anómalo. El factor de Landé. Efecto Paschen-Back. La estructura hiperfina de las líneas espectrales como consecuencia del efecto isotópico y el spin nuclear.

2: Química Cuántica (Enlace químico): 7 horas de teoría + 16 horas de prácticas de ordenador.

El enlace químico. Breve resumen de las teorías propuestas para su explicación. Aproximación de Born-Oppenheimer. El enlace en la molécula ión-hidrógeno. Orbitales moleculares. El enlace en moléculas diatómicas homo- y heteronucleares. Moléculas poliatómicas.

3: Química Física de Superficies: 27 horas de teoría y problemas + 10 horas de prácticas de laboratorio.

Interfases y tensión interfacial. Interfases curvas; ecuación de Young-Laplace. Capilaridad. Determinación experimental de tensiones superficiales. Isoterma de adsorción de Gibbs. Formación de monocapas; detergencia. Adsorción de gases sobre superficies sólidas. Isotermas de adsorción. Catálisis heterogénea. Catálisis enzimática: mecanismo de Michaelis-Menten. Inhibición de la catálisis enzimática: inhibición reversible e irreversible. La interfase electrificada: estructura y características. Termodinámica y modelos de las superficies electrificadas. Introducción a la Cinética Electrónica. Sobretenensión de transferencia de carga. Sobretenensión de difusión. Aplicaciones: deposición electrolítica y corrosión de metales.

Planificación y calendario

Calendario de sesiones presenciales y presentación de trabajos

El calendario de la asignatura en cuanto a clases presenciales se podrá consultar en:
<http://ciencias.unizar.es/web/horarios.do>

El calendario de sesiones prácticas se anunciará oportunamente en clase y en los tablones del departamento.

Bibliografía

La bibliografía recomendada es la siguiente:

1:

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

- Química Cuántica (5ª edición). I.N. Levine. Ed. Prentice Hall (Pearson) 2001.
- Química Física (1ª edición). T. Engel y F. Reid. Ed. Prentice Hall (Pearson) 2006.
- Quantum Chemistry D.V. George. Ed. Pergamon Press Inc. 1972.
- Fisicoquímica (5ª edición). Vol. 1 Ira N. Levine Ed. Mc Graw Hill 2004.
- Química Física, Vol. 1 y 2 (1ª edición). J. Bertrán Rusca y J. Núñez Delgado; Ed. Ariel 2002.
- Electroquímica Moderna (1ª edición). J. O'M. Bockris y A.K.N. Reddy. Ed. Reverté 1978.

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

- Fisicoquímica para Farmacia y Biología; P. Sanz Pedrero; Ed. Masson-Salvat 1992.

Referencias bibliográficas de la bibliografía recomendada

- Bockris, John O'M.. Electroquímica moderna / John O'M. Bockris and Amulya K. N. Reddy ; versión española por José Beltrán Barcelona [etc] : Reverté, D.L.1978-1980
- Engel, Thomas. Química física / Thomas Engel, Philip Reid ; capítulo 27, Química computacional, contribución de Warren Hehre ; traducción y revisión técnica, Alberto Requena Rodríguez, José Zúñiga Román, Adolfo Bastida Pascual Madrid [etc.] : Pearson Addison Wesley, D.L. 2006
- Fisicoquímica para Farmacia y Biología / Coordinador P. Sanz Pedrero. Barcelona, [etc.] : Masson, 1996
- George, David V.. Principles of Quantum Chemistry . Pergamon Press, 1972
- Levine, Ira N.. Fisicoquímica / Ira N. Levine ; traducción, Angel González Ureña ; con la colaboración de Antonio Rey Gayo ... [et al.] . - 5ª ed. Madrid [etc.] : McGraw-Hill, cop. 2004
- Levine, Ira N.. Química cuántica / Ira N. Levine ; traducción Alberto Requena Rodríguez, Adolfo Bastida Pascual, José Zúñiga Román . - 5ª ed. Madrid [etc.] : Prentice Hall, D.L. 2001
- Química física / Joan Bertrán Rusca y Javier Núñez Delgado (coords.) Barcelona : Ariel, cop. 2002