

Proyecto/Guía docente de la asignatura

Se debe indicar de forma fiel cómo va a ser desarrollada la docencia. Esta guía debe ser elaborada teniendo en cuenta a todos los profesores de la asignatura. Conocidos los espacios y profesorado disponible. Los detalles de la asignatura serán informados por el Campus Virtual.

Se recuerda la importancia que tienen los comités de título en su labor de verificar la coherencia de las guías docentes de acuerdo con lo recogido en la memoria de verificación del título y/o en sus planes de mejora. Por ello, tanto la guía, como cualquier modificación que sufra en aspectos "regulados" (competencias, metodologías, criterios de evaluación y planificación, etc..) deberá estar informada favorablemente por el comité de título ANTES de ser colgada en la aplicación web de la UVa. Se ha añadido una fila en la primera tabla para indicar la fecha en la que el comité revisó la guía.

Asignatura	Química Física I		
Materia	Química Física		
Módulo			
Titulación	Grado en Química		
Plan	611	Código	45947
Periodo de impartición	1 <u>er</u> Cuatrimestre	Tipo/Carácter	Obligatoria
Nivel/Ciclo	1 ^{er} Ciclo	Curso	Segundo
Créditos ECTS	6		
Lengua en que se imparte	Español		
Profesor/es responsable/s	Carmen Barrientos Benito, Pilar Re <mark>dond</mark> o Cristóbal		
Datos de contacto (E-mail, teléfono)	carmen.barrientos@uva.es, pilar.redondo@uva.es		
Departamento	Química Física y Química Inorgánica		
Fecha de revisión por el Comité de Título	17-7-2023		



1. Situación / Sentido de la Asignatura

1.1 Contextualización

La asignatura pertenece a la **materia Química Física** dentro del **bloque obligatorio** de 60 ECTS del segundo curso de la titulación. Este bloque permite a los alumnos adquirir un conocimiento inicial de las distintas ramas de la Química: Química Inorgánica, Química Orgánica, Química Analítica y Química Física

1.2 Relación con otras materias

La asignatura está relacionada con las asignaturas Química I y Física I que se imparten en el primer curso de la titulación

1.3 Prerrequisitos

Se requiere que el alumno conozca los conceptos básicos de Química, Física y Matemáticas introducidos en las materias de formación básica correspondientes de primer curso





2. Competencias

2.1 Generales

- G.1.- Ser capaz de comunicarse con corrección tanto de forma oral como escrita.
- G.2.- Ser capaz de resolver problemas tanto de naturaleza cualitativa como cuantitativa y de tomar decisiones.
- G.3.- Ser capaz de encontrar y manejar información, tanto de fuentes primarias como secundarias.
- **G.4.** Ser capaz de trabajar de forma eficaz y autónoma mediante la planificación y la organización de su trabajo y de su tiempo.
- **G.8.** Poseer los hábitos, capacidad de aprendizaje y autonomía necesarios para proseguir su formación posterior.
- **G.9.** Conocer y apreciar las responsabilidades éticas y profesionales.

También se promoverán las siguientes competencias generales:

- **G.6.-** Conseguir utilizar con destreza las tecnologías de la información.
- **G.7.-** Introducción al lenguaje científico en inglés. Alcanzar un manejo del idioma inglés suficiente para leer y comunicarse, en aspectos generales y también específicos de su campo científico. Se fomentarán las lecturas complementarias en inglés.

2.2 Específicas

- EC1.- Conocer y manejar los aspectos principales de terminología química
- EC2.- Conocer la tabla periódica, su utilidad y las tendencias periódicas en las propiedades de los elementos
- **EC4.** Comprender los principios fisicoquímicos que rigen las reacciones químicas y conocer los tipos fundamentales de reacciones químicas.
- EC5.- Conocer los principales tipos de compuestos orgánicos e inorgánicos
- **EH1.** Ser capaz de demostrar el conocimiento y comprensión de conceptos, principios y teorías esenciales en relación con la química
- **EH2**.-Ser capaz de aplicar los conocimientos adquiridos a la resolución de problemas cualitativos y cuantitativos.
- EH.4- Ser capaz de analizar, interpretar y evaluar información y datos químicos.



3. Objetivos

- 1. Conocer los orígenes de la Mecánica Cuántica.
- 2. Entender los principios y conceptos de la Mecánica Cuántica.
- 3. Conocer la utilidad de los sistemas modelo en Mecánica Cuántica.
- 4. Conocer el método Mecano-Cuántico y su aplicación al átomo de hidrógeno.
- 5. Comprender la importancia y aplicabilidad de los métodos aproximados
- 6. Entender el enlace químico y la estructura molecular y describir ésta última de forma cuantitativa en moléculas diatómicas
- 7. Comprender y utilizar la información bibliográfica y técnica referida a los fenómenos fisicoquímicos





4. Contenidos y/o bloques temáticos

Bloque 1: FUNDAMENTOS

Carga de trabajo en créditos ECTS:

a. Contextualización y justificación

El primer bloque de fundamentos es un bloque introductorio en el que se explican los hechos fundamentales que pusieron de manifiesto las limitaciones de la física clásica. Además, a lo largo del bloque se establecen las bases de la Química Cuántica introduciéndose las herramientas fundamentales

b. Objetivos de aprendizaje

- 1. Entender el contexto en el que se encuentra la Química Cuántica dentro de la Química Física.
- 2. Conocer los hechos experimentales que pusieron de manifiesto las limitaciones de la Física clásica: radiación del cuerpo negro, efecto fotoeléctrico y Compton y espectros atómicos.
- 3. Entender la hipótesis de Planck y la interpretación de Einstein.
- 4. Entender la hipótesis ondulatoria-corpuscular de De Broglie
- 5. Entender los principios de la Mecánica Cuántica.
- 6. Conocer el significado físico de la función de onda.
- 7. Entender el concepto de estado estacionario.
- 8. Entender el principio de indeterminación de Heisenberg
- 9. Entender el modelo de partícula libre
- 10. Conocer y saber aplicar el modelo de partícula en una caja.
- 11. Entender el concepto de cuantización de la energía.
- 12. Comprender el concepto de degeneración
- 13. Entender el efecto túnel mecanocuántico
- 14. Conocer el modelo de oscilador armónico.
- 15. Conocer los modelos de partícula en un anillo y partícula sobre una esfera.
- 16. Conocer y saber aplicar los operadores de momento angular
- 17. Saber interpretar los armónicos esféricos como funciones propias del operador cuadrado del momento angular total.
- 18. Conocer y saber aplicar el modelo de rotor rígido al problema de la molécula diatómica

c. Contenidos

Tema 1.- BASES FÍSICAS DE LA QUÍMICA CUÁNTICA

Introducción.- Radiación del cuerpo negro. Hipótesis de Planck.- Efecto fotoeléctrico.- Capacidades caloríficas.- Espectros atómicos.- Principio de De Broglie: efecto Compton y difracción de electrones.

Tema 2.- ESTRUCTURA FORMAL: LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER

Postulados de la Mecánica Cuántica. Operadores hermíticos. La ecuación de ondas de Schrödinger. Ortogonalidad de las funciones de onda.- Interpretación física de la función de onda.- Conmutación de



operadores. Funciones propias simultáneas.- Principio de indeterminación de Heisenberg.- Estados estacionarios.

Tema 3.- SOLUCIÓN EXACTA: DINÁMICA DE LA TRASLACIÓN

La partícula libre.- Partícula en una caja monodimensional: examen de las soluciones.- Partícula en una caja tridimensional: estados degenerados.- Método del electrón libre.- Barreras de potencial finito y efecto túnel.- Oscilador armónico.

Tema 4.- SOLUCIÓN EXACTA: DINÁMICA DE LA ROTACIÓN

Partícula en una circunferencia a potencial constante.- Partícula en una superficie esférica: armónicos esféricos.- Momento angular: relaciones de conmutación.- Rotor rígido.

d. Métodos docentes

Las clases presenciales se basarán en clases expositivas (lecciones magistrales o *lectures*) para el desarrollo de los fundamentos teóricos, y clases prácticas de problemas, más participativas, en las que se resolverán ejercicios y problemas. En todos los casos, se utilizarán aquellas T.I.C. que favorezcan la comprensión y participación de los alumnos.

En las tutorías programadas se tratarán de forma pormenorizada cuestiones o dudas relacionadas con la asignatura.

Los alumnos dispondrán en la plataforma MOODLE de la UVa (http://campusvirtual.uva.es/) de toda la información básica requerida: Guía docente, contenidos-presentaciones, ejercicios de autoevaluación, colección de problemas para desarrollar en las clases prácticas, colección de exámenes de años anteriores, ejercicios y problemas de exámenes resueltos, materiales adicionales (links de interés, hojas de cálculo, ficheros. Etc. La plataforma MOODLE se utilizará para entregar las tareas en formato electrónico, así como para el intercambio de opiniones, resolución de dudas, etc. Los alumnos accederán a la misma utilizando las cuentas y claves que, de forma automática, les proporciona la Universidad de Valladolid

Cuestionario en Moodle. Se realizará un cuestionario en Moodle. Este cuestionario se plantea como una herramienta de ayuda a la hora de preparar la asignatura, más que como una herramienta de evaluación. Es contestado en casa como una actividad encomendada y en un tiempo determinado.

e. Plan de trabajo

Actividades en las sesiones dedicadas a Teoría (PRESENCIALES).

Clase magistral con exposición de fundamentos teóricos por parte del profesor

Actividades dedicadas a la resolución de Problemas (PRESENCIALES).

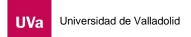
· Clases de problemas participativas

Actividades fuera del aula (NO PRESENCIALES)

- Preparación, ampliación y estudio del material
- Resolución de ejercicios y problemas

Tutorías

Control





f. Evaluación

La evaluación de los alumnos se realizará mediante:

- a) Realización de tareas (5%): consistirá en la resolución de cuestionarios
- b) Realización de controles (25%): controles periódicos.
- c) Examen final (70%): Constará de dos partes: teórica y de resolución de ejercicios numéricos.

g Material docente

Es fundamental que las referencias suministradas este curso estén actualizadas y sean completas. Los profesores tienen acceso, a la **plataforma Leganto de la Biblioteca** para actualizar su bibliografía recomendada ("Listas de Lecturas"). Si ya lo han hecho, pueden poner tanto en la guía docente como en el Campus Virtual el enlace permanente a Leganto.

La Biblioteca se basa en la bibliografía recomendada en la Guía docente para adaptar su colección a las necesidades de docencia y aprendizaje de las titulaciones.

Si tienes que actualizar tu bibliografía, el enlace es el siguiente, https://buc-uva.alma.exlibrisgroup.com/leganto/login?auth=SAML (acceso mediante tus claves UVa). Este enlace te envía a la página de autenticación del directorio UVa, el cual te redirige a Leganto. Una vez allí, aparecerán, por defecto, las listas de lectura correspondientes a las distintas asignaturas que impartes ("instructor" en la terminología de Leganto / Alma). Desde aquí podrías añadir nuevos títulos a las listas existentes, crear secciones dentro de ellas o, por otra parte, crear nuevas listas de bibliografía recomendada.

Puedes consultar las listas de lectura existentes mediante el buscador situado en el menú de arriba a la izquierda, opción "búsqueda de listas".

En la parte superior derecha de cada lista de lectura se encuentra un botón con el signo de omisión "•••" (puntos suspensivos), a través del cual se despliega un menú que, entre otras opciones, permite "Crear un enlace compartible" que puede dirigir o bien a la lista de lectura concreta o bien al "Curso" (asignatura). Este enlace se puede indicar tanto en el apartado "g. Materiales docentes" (y subapartados) de la Guía Docente como en la sección de Bibliografía correspondiente a la asignatura en el Campus Virtual Uva.

Para resolver cualquier duda puedes consultar con la biblioteca de tu centro. Guía de Ayuda al profesor

g.1 Bibliografía básica

- Atkins, P. W., de Paula, J., "Química Física", Editorial Medica Panamericana (2008).
- Levine, I.N., "Fisicoquímica", 5ª ed. McGraw Hill (2005).
- McQuarrie, D.A., Simon, J.D., "Physical Chemistry: a Molecular Approach", University Science Books (1997).
- Bertrán Rusca, J, Núñez Delgado, J. (coord.), "Química Física", Ariel Ciencia (2002).
- Berry, R. S.; Rice, S. A.; Ross, J.: "Physical Chemistry", 2nd ed., Oxford University Press, New York, 2000
- Laidler, K. J. and Meiser, J. H. "Physical Chemistry," Houghton Mifflin Company, Boston, 1999
- Mortimer, R. G. "Physical Chemistry", Benjamin/Cummings, Redwood, 2000

g.2. Bibliografía complementaria

- Bertrán Rusca, J. y co-autores, "Química Cuántica: Fundamentos y Aplicaciones Computacionales),
 Síntesis (2000).
- Levine, I. N. Quantum Chemistry, Prentice-Hall, New Jersey, 2001. (Versión castellana: Pearson Educación, Madrid, 2001).
- McQuarrie, D.A. "Quantum Chemistry", Oxford University Press, Oxford, 1983.
- Pilar, F. L. "Elementary Quantum Chemistry", McGraw-Hill, New York, 1990.
- Lowe, J.P. "Quantum Chemistry", Academic Press, New York, 1993.





g.3 Otros recursos telemáticos (píldoras de conocimiento, blogs, videos, revistas digitales, cursos masivos (MOOC), ...)

h. Recursos necesarios

La Facultad de Ciencias dispone de aulas con los recursos necesarios para desarrollar las clases teóricas de problemas y los seminarios.

i. Temporalización

CARGA ECTS	PERIODO PREVISTO DE DESARROLLO	
Tema 1 (0.8 ECTS)	(8 horas)	
Tema 2 (0.6 ECTS)	(6 horas)	
Tema 3 (1 ECTS)	(10 horas)	
Tema 4 (0.6 ECTS)	(6 horas)	

Bloque 2: ESTRUCTURA ATÓMICA

Carga de trabajo en créditos ECTS: 1.5

a. Contextualización y justificación

El segundo bloque se dedica al estudio de la estructura atómica. Se comienza la sesión a través del estudio del átomo de hidrógeno, único sistema real junto con los átomos hidrogenoides que admite resolución exacta de la ecuación de Schrödinger. Posteriormente se llevará a cabo el tratamiento mecanocuántico de átomos polielectrónicos y se sientan las bases de los métodos aproximados.

b. Objetivos de aprendizaje

- 1 Aplicar el método Mecano-Cuántico al estudio del átomo de hidrógeno
- 2 Conocer el concepto de orbital atómico
- 3 Entender el espectro del átomo de hidrógeno
- 4 Conocer el concepto de spin.
- 5 Conocer las dificultades que presenta el átomo de helio para su estudio Mecano-Cuántico
- 6 Entender el principio de antisimetría
- 7 Conocer la utilidad de los determinantes de Slater.
- 8 Entender la interacción spin-órbita,
- 9 Conocer el acoplamiento de Russell-Saunders y el acoplamiento jj
- 10 Entender los efectos Stark y Zeeman normal y anómalo.
- 11 Entender bases del principio variacional
- 12 Conocer el método de variaciones lineal



- 13 Saber aplicar la teoría de perturbaciones
- 14 Conocer las ecuaciones de Hartree-Fock
- 15 Entender el significado de las integrales de Coulomb y de canje,
- 16 Conocer el proceso de resolución iterativo (método de campo autoconsistente).





c. Contenidos

Tema 5.- EL ÁTOMO DE HIDRÓGENO

Movimiento en un campo de fuerzas centrales. Solución de la ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno.- Niveles de energía del átomo de hidrógeno.- Funciones de onda: orbitales.- Átomos hidrogenoides.- Momento angular orbital en el átomo de hidrógeno.- Spin electrónico.- Sistema de unidades atómico

Tema 6.- ÁTOMOS POLIELECTÓNICOS

Partículas indiscernibles: principio de exclusión de Pauli.- Átomos de helio y de litio.- Determinantes de Slater. Momento angular en átomos polielectrónicos: interacción spin-órbita.- Aproximación LS y jj. Términos, niveles y estados.- Espectros atómicos: reglas de selección.- Efecto Zeeman.- Métodos aproximados.

d. Métodos docentes

Las clases presenciales se basarán en clases expositivas (lecciones magistrales o *lectures*) para el desarrollo de los fundamentos teóricos, y clases prácticas de problemas, más participativas, en las que se resolverán ejercicios y problemas. En todos los casos, se utilizarán aquellas T.I.C. que favorezcan la comprensión y participación de los alumnos.

En las tutorías programadas se tratarán de forma pormenorizada cuestiones o dudas relacionadas con la asignatura.

Los alumnos dispondrán en la plataforma MOODLE de la UVa (http://campusvirtual.uva.es/) de toda la información básica requerida: Guía docente, contenidos-presentaciones, ejercicios de autoevaluación, colección de problemas para desarrollar en las clases prácticas, colección de exámenes de años anteriores, ejercicios y problemas de exámenes resueltos, materiales adicionales (links de interés, hojas de cálculo, ficheros. Etc. La plataforma MOODLE se utilizará para entregar las tareas en formato electrónico, así como para el intercambio de opiniones, resolución de dudas, etc. Los alumnos accederán a la misma utilizando las cuentas y claves que, de forma automática, les proporciona la Universidad de Valladolid

Cuestionario en Moodle. Se realizará un cuestionario en Moodle. Este cuestionario se plantea como una herramienta de ayuda a la hora de preparar la asignatura, más que como una herramienta de evaluación. Es contestado en casa como una actividad encomendada y en un tiempo determinado.

e. Plan de trabajo

Actividades en las sesiones dedicadas a Teoría (PRESENCIALES).

Clase magistral con exposición de fundamentos teóricos por parte del profesor

Actividades dedicadas a la resolución de Problemas (PRESENCIALES).

· Clases de problemas participativas

Actividades fuera del aula (NO PRESENCIALES)

- Preparación, ampliación y estudio del material
- Resolución de ejercicios y problemas

Tutorías

Control





f. Evaluación

La evaluación de los alumnos se realizará mediante:

- a) Realización de tareas (5%): consistirá en la resolución de cuestionarios
- b) Realización de controles (25%): controles periódicos.
- c) Examen final (70%): Constará de dos partes: teórica y de resolución de ejercicios numéricos.

g Material docente

Es fundamental que las referencias suministradas este curso estén actualizadas y sean completas. Los profesores tienen acceso, a la **plataforma Leganto de la Biblioteca** para actualizar su bibliografía recomendada ("Listas de Lecturas"). Si ya lo han hecho, pueden poner tanto en la guía docente como en el Campus Virtual el enlace permanente a Leganto.

La Biblioteca se basa en la bibliografía recomendada en la Guía docente para adaptar su colección a las necesidades de docencia y aprendizaje de las titulaciones.

Si tienes que actualizar tu bibliografía, el enlace es el siguiente, https://buc-uva.alma.exlibrisgroup.com/leganto/login?auth=SAML (acceso mediante tus claves UVa). Este enlace te envía a la página de autenticación del directorio UVa, el cual te redirige a Leganto. Una vez allí, aparecerán, por defecto, las listas de lectura correspondientes a las distintas asignaturas que impartes ("instructor" en la terminología de Leganto / Alma). Desde aquí podrías añadir nuevos títulos a las listas existentes, crear secciones dentro de ellas o, por otra parte, crear nuevas listas de bibliografía recomendada.

Puedes consultar las listas de lectura existentes mediante el buscador situado en el menú de arriba a la izquierda, opción "búsqueda de listas".

En la parte superior derecha de cada lista de lectura se encuentra un botón con el signo de omisión "•••" (puntos suspensivos), a través del cual se despliega un menú que, entre otras opciones, permite "Crear un enlace compartible" que puede dirigir o bien a la lista de lectura concreta o bien al "Curso" (asignatura). Este enlace se puede indicar tanto en el apartado "g. Materiales docentes" (y subapartados) de la Guía Docente como en la sección de Bibliografía correspondiente a la asignatura en el Campus Virtual Uva.

Para resolver cualquier duda puedes consultar con la biblioteca de tu centro. Guía de Ayuda al profesor

g.1 Bibliografía básica

- Atkins, P. W., de Paula, J., "Química Física", Editorial Medica Panamericana (2008).
- Levine, I.N., "Fisicoquímica", 5^a ed. McGraw Hill (2005).
- McQuarrie, D.A., Simon, J.D., "Physical Chemistry: a Molecular Approach", University Science Books (1997).
- Bertrán Rusca, J, Núñez Delgado, J. (coord.), "Química Física", Ariel Ciencia (2002).
- Berry, R. S.; Rice, S. A.; Ross, J.: "Physical Chemistry", 2nd ed., Oxford University Press, New York, 2000
- Laidler, K. J. and Meiser, J. H. "Physical Chemistry," Houghton Mifflin Company, Boston, 1999
- Mortimer, R. G. "Physical Chemistry", Benjamin/Cummings, Redwood, 2000

g.2. Bibliografía complementaria

- Bertrán Rusca, J. y co-autores, "Química Cuántica: Fundamentos y Aplicaciones Computacionales),
 Síntesis (2000).
- Levine, I. N. Quantum Chemistry, Prentice-Hall, New Jersey, 2001. (Versión castellana: Pearson Educación, Madrid, 2001).
- McQuarrie, D.A. "Quantum Chemistry", Oxford University Press, Oxford, 1983.
- Pilar, F. L. "Elementary Quantum Chemistry", McGraw-Hill, New York, 1990.
- Lowe, J.P. "Quantum Chemistry", Academic Press, New York, 1993.





g.3 Otros recursos telemáticos (píldoras de conocimiento, blogs, videos, revistas digitales, cursos masivos (MOOC), ...)

h. Recursos necesarios

La Facultad de Ciencias dispone de aulas con los recursos necesarios para desarrollar las clases teóricas de problemas y los seminarios.

i. Temporalización

CARGA ECTS	PERIODO PREVISTO DE DESARROLLO
Tema 5 (0.8 ECTS)	(8 horas)
Tema 6 (0.7 ECTS)	(7 Horas)

Bloque 3: ESTRUCTURA MOLECULAR

Carga de trabajo en créditos ECTS: 1.5

a. Contextualización y justificación

En el tercer bloque se aplica el método mecanocuántico al estudio de sistemas moleculares. Dentro de esta sección se sigue un procedimiento que implica el estudio de sistemas de complejidad creciente, Se comienza con el tratamiento de la molécula ion de hidrógeno, se continúa con el estudio de la molécula de hidrógeno para abordar por último las moléculas diatómicas homo- y heteronucleares.

b. Objetivos de aprendizaje

- 1 Entender la aproximación de Born-Oppenheimer
- 2 Conocer el tratamiento la molécula-ion de hidrógeno
- 3 Entender las bases de la teoría de orbitales moleculares
- 4 Comprender el concepto de orbital molecular
- 5 Aplicar la aproximación de la combinación lineal de orbitales atómicos,
- 6 Conocer las bases de la teoría de enlace de valencia
- 7 Entender el tratamiento mecano-cuántico de la molécula de hidrógeno Entender el tratamiento de las moléculas diatómicas homonucleares,
- 8 Entender el tratamiento de las moléculas diatómicas homonucleares,
- 9 Conocer los diagramas de correlación,
- 10 Conocer el tratamiento de las moléculas diatómicas heteronucleares
- 11 Entender el concepto de polaridad de los enlaces

c. Contenidos





Tema 7.- INTRODUCCIÓN AL TRATAMIENTO MECANO-CUÁNTICO DE MOLÉCULAS

Hamiltoniano molecular. Separación de los movimientos electrónicos y nucleares: aproximación de Born-Oppenheimer.- La molécula-ión de hidrógeno.- Separabilidad de los movimientos nucleares. Estados de rotación y vibración.

Tema 8.- MOLÉCULAS DIATÓMICAS

Teoría de Orbitales Moleculares (MO).- Aproximación de la Combinación Lineal de Orbitales Atómicos (LCAO MO): El ión-molécula de Hidrógeno.- Moléculas diatómicas homonucleares: Consideraciones de simetría.- Moléculas diatómicas, heteronucleares.- Teoría del Enlace de Valencia (VB): La molécula de hidrógeno.- Estudio comparativo MO y VB.

d. Métodos docentes

Las clases presenciales se basarán en clases expositivas (lecciones magistrales o *lectures*) para el desarrollo de los fundamentos teóricos, y clases prácticas de problemas, más participativas, en las que se resolverán ejercicios y problemas. En todos los casos, se utilizarán aquellas T.I.C. que favorezcan la comprensión y participación de los alumnos.

En las tutorías programadas se tratarán de forma pormenorizada cuestiones o dudas relacionadas con la asignatura.

Los alumnos dispondrán en la plataforma MOODLE de la UVa (http://campusvirtual.uva.es/) de toda la información básica requerida: Guía docente, contenidos-presentaciones, ejercicios de autoevaluación, colección de problemas para desarrollar en las clases prácticas, colección de exámenes de años anteriores, ejercicios y problemas de exámenes resueltos, materiales adicionales (links de interés, hojas de cálculo, ficheros. Etc. La plataforma MOODLE se utilizará para entregar las tareas en formato electrónico, así como para el intercambio de opiniones, resolución de dudas, etc. Los alumnos accederán a la misma utilizando las cuentas y claves que, de forma automática, les proporciona la Universidad de Valladolid

Cuestionario en Moodle. Se realizará un cuestionario en Moodle. Este cuestionario se plantea como una herramienta de ayuda a la hora de preparar la asignatura, más que como una herramienta de evaluación. Es contestado en casa como una actividad encomendada y en un tiempo determinado.

e. Plan de trabajo

Actividades en las sesiones dedicadas a Teoría (PRESENCIALES).

Clase magistral con exposición de fundamentos teóricos por parte del profesor

Actividades dedicadas a la resolución de Problemas (PRESENCIALES).

Clases de problemas participativas

Actividades fuera del aula (NO PRESENCIALES)

- · Preparación, ampliación y estudio del material
- · Resolución de ejercicios y problemas

Tutorías

Control

f. Evaluación





La evaluación de los alumnos se realizará mediante:

- a) Realización de tareas (5%): consistirá en la resolución de cuestionarios
- b) Realización de controles (25%): controles periódicos.
- c) Examen final (70%): Constará de dos partes: teórica y de resolución de ejercicios numéricos.

g Material docente

Es fundamental que las referencias suministradas este curso estén actualizadas y sean completas. Los profesores tienen acceso, a la **plataforma Leganto de la Biblioteca** para actualizar su bibliografía recomendada ("Listas de Lecturas"). Si ya lo han hecho, pueden poner tanto en la guía docente como en el Campus Virtual el enlace permanente a Leganto.

La Biblioteca se basa en la bibliografía recomendada en la Guía docente para adaptar su colección a las necesidades de docencia y aprendizaje de las titulaciones.

Si tienes que actualizar tu bibliografía, el enlace es el siguiente, https://buc-uva.alma.exlibrisgroup.com/leganto/login?auth=SAML (acceso mediante tus claves UVa). Este enlace te envía a la página de autenticación del directorio UVa, el cual te redirige a Leganto. Una vez allí, aparecerán, por defecto, las listas de lectura correspondientes a las distintas asignaturas que impartes ("instructor" en la terminología de Leganto / Alma). Desde aquí podrías añadir nuevos títulos a las listas existentes, crear secciones dentro de ellas o, por otra parte, crear nuevas listas de bibliografía recomendada.

Puedes consultar las listas de lectura existentes mediante el buscador situado en el menú de arriba a la izquierda, opción "búsqueda de listas".

En la parte superior derecha de cada lista de lectura se encuentra un botón con el signo de omisión "•••" (puntos suspensivos), a través del cual se despliega un menú que, entre otras opciones, permite "Crear un enlace compartible" que puede dirigir o bien a la lista de lectura concreta o bien al "Curso" (asignatura). Este enlace se puede indicar tanto en el apartado "g. Materiales docentes" (y subapartados) de la Guía Docente como en la sección de Bibliografía correspondiente a la asignatura en el Campus Virtual Uva.

Para resolver cualquier duda puedes consultar con la biblioteca de tu centro. Guía de Ayuda al profesor

g.1 Bibliografía básica

- Atkins, P. W., de Paula, J., "Química Física", Editorial Medica Panamericana (2008).
- Levine, I.N., "Fisicoquímica", 5^a ed. McGraw Hill (2005).
- McQuarrie, D.A., Simon, J.D., "Physical Chemistry: a Molecular Approach", University Science Books (1997).
- Bertrán Rusca, J, Núñez Delgado, J. (coord.), "Química Física", Ariel Ciencia (2002).
- Berry, R. S.; Rice, S. A.; Ross, J.: "Physical Chemistry", 2nd ed., Oxford University Press, New York, 2000
- Laidler, K. J. and Meiser, J. H. "Physical Chemistry," Houghton Mifflin Company, Boston, 1999
- Mortimer, R. G. "Physical Chemistry", Benjamin/Cummings, Redwood, 2000

g.2. Bibliografía complementaria

- Bertrán Rusca, J. y co-autores, "Química Cuántica: Fundamentos y Aplicaciones Computacionales), Síntesis (2000).
- Levine, I. N. Quantum Chemistry, Prentice-Hall, New Jersey, 2001. (Versión castellana: Pearson Educación, Madrid, 2001).
- McQuarrie, D.A. "Quantum Chemistry", Oxford University Press, Oxford, 1983.
- Pilar, F. L. "Elementary Quantum Chemistry", McGraw-Hill, New York, 1990.
- Lowe, J.P. "Quantum Chemistry", Academic Press, New York, 1993.

g.3 Otros recursos telemáticos (píldoras de conocimiento, blogs, videos, revistas digitales, cursos masivos (MOOC), ...)





h. Recursos necesarios

La Facultad de Ciencias dispone de aulas con los recursos necesarios para desarrollar las clases teóricas de problemas y los seminarios.

i. Temporalización

CARGA ECTS	PERIODO PREVISTO DE DESARROLLO
Tema 7 (0.8 ECTS)	(8 horas)
Tema 8 (0.7 ECTS)	(7 horas)

5. Métodos docentes y principios metodológicos

Para la enseñanza de los fundamentos teóricos se utilizarán sesiones presenciales que se basarán en clases expositivas (lecciones magistrales o *lectures*): Para las clases prácticas de seminarios se llevarán a cabo sesiones más participativas, en las que se resolverán ejercicios y problemas. Se utilizarán en ambos casos aquellas T.I.C. que favorezcan la comprensión y participación de los alumnos.

En las tutorías programadas se tratarán de forma pormenorizada bien sea individualmente o en pequeños grupos cuestiones o dudas relacionadas con la asignatura.

Durante el curso se desarrollarán distintos Cuestionarios en Moodle. Estos cuestionarios se plantean como una herramienta de ayuda a la hora de preparar la asignatura, más que como una herramienta de evaluación. EL cuestionario se contesta fuera de las clases de aula de forma individual como una actividad encomendada y en un tiempo determinado.

Toda la información que se requiere para el desarrollo de la asignatura se encuentra recogida en la plataforma MOODLE de la UVa (http://campusvirtual.uva.es/): Guía docente, contenidos-presentaciones, ejercicios de autoevaluación, colección de problemas para desarrollar en las clases prácticas, ejercicios y problemas de exámenes resueltos, materiales adicionales (links de interés, hojas de cálculo, ficheros. Etc. La plataforma MOODLE se utiliza, además para entregar las tareas en formato electrónico, así como para el intercambio de opiniones, resolución de dudas, etc. Los alumnos accederán a la misma utilizando las cuentas y claves que, de forma automática, les proporciona la Universidad de Valladolid



6. Tabla de dedicación del estudiante a la asignatura

ACTIVIDADES PRESENCIALES o PRESENCIALES A DISTANCIA ⁽¹⁾	HORAS	ACTIVIDADES NO PRESENCIALES	HORAS
Clases teóricas	40	Estudio y trabajo autónomo individual	80
Clases prácticas	11	Estudio y trabajo autónomo grupal	10
Laboratorios			
Prácticas externas, clínicas o de campo			
Seminarios	3		
Otras actividades	6		
Total presencial	60	Total no presencial	90
		TOTAL presencial + no presencial	150

⁽¹⁾ Actividad presencial a distancia es cuando un grupo sigue una videoconferencia de forma síncrona a la clase impartida por el profesor para otro grupo presente en el aula.

7. Sistema y características de la evaluación

INSTRUMENTO/PROCEDIMIENTO	PESO EN LA NOTA FINAL	OBSERVACIONES
TAREAS	5%	Cuestionarios en Moodle
CONTROLES	25%	
EXAMEN FINAL	70%	Constará de dos partes: teórica y de resolución de ejercicios numéricos.

CRITERIOS DE CALIFICACIÓN

Convocatoria ordinaria:

Se obtendrá la calificación final utilizando la siguiente fórmula

0.3 (Evaluación Continua) +0.7 (Examen Final)

Convocatoria extraordinaria:

Examen final (100%)

(*) Se entiende por convocatoria extraordinaria la segunda convocatoria.

Art 35.4 del ROA 35.4. La participación en la convocatoria extraordinaria no quedará sujeta a la asistencia a clase ni a la presencia en pruebas anteriores, salvo en los casos de prácticas externas, laboratorios u otras actividades cuya evaluación no fuera posible sin la previa realización de las mencionadas pruebas.

https://secretariageneral.uva.es/wp-content/uploads/VII.2.-Reglamento-de-Ordenacion-Academica.pdf

8. Consideraciones finales





La utilización y difusión de materiales docentes sin la autorización expresa de su autor es un uso prohibido que atenta contra el derecho a la propiedad intelectual y puede constituir un ilícito civil o incluso penal, generando responsabilidades legales a la persona infractora.

