

## 27213 - Química física II

### Información del Plan Docente

**Año académico:** 2023/24

**Asignatura:** 27213 - Química física II

**Centro académico:** 100 - Facultad de Ciencias

**Titulación:** 452 - Graduado en Química

**Créditos:** 11.0

**Curso:** 3

**Periodo de impartición:** Anual

**Clase de asignatura:** Obligatoria

**Materia:**

### 1. Información básica de la asignatura

La asignatura aborda contenidos básicos de Química Cuántica y de Fenómenos Superficiales, Catálisis Heterogénea y Cinética Electroquímica.

Los objetivos de la asignatura son:

1. Conocer los fundamentos de la mecánica cuántica y su aplicación en sistemas de interés en Química, entre otros la teoría de orbitales moleculares
2. Conocer los conceptos fundamentales de la química física de superficies y aplicarlos al estudio de sistemas de interés y a la resolución de cuestiones y problemas
3. Introducirse en el manejo de programas informáticos para el estudio de la estructura electrónica de átomos y moléculas
4. Aplicar diferentes técnicas experimentales para el estudio de fenómenos químico-físicos que tienen lugar en las interfases

Estos planteamientos están alineados con los siguientes Objetivos de Desarrollo Sostenible (ODS):

- Objetivo 4: Educación de calidad
- Objetivo 7: Energía asequible y no contaminante
- Objetivo 9: Industria, innovación e infraestructuras
- Objetivo 12: Producción y consumo responsables

Para matricularse en esta asignatura es necesario haber cursado la asignatura Química Física I.

### 2. Resultados de aprendizaje

Las competencias y resultados de aprendizaje aparecen descritos en la memoria de verificación ([https://academico.unizar.es/sites/academico.unizar.es/files/archivos/ofiplan/memorias/grado/ciencias/mv\\_127.pdf](https://academico.unizar.es/sites/academico.unizar.es/files/archivos/ofiplan/memorias/grado/ciencias/mv_127.pdf)),

Una vez superada la asignatura se espera que el estudiante:

1. Comprenda y maneje la terminología básica propia de la Química Cuántica y de la Química Física de Superficies.
2. Sea capaz de resolver problemas sencillos utilizando el método mecano-cuántico con aplicación en Espectroscopía.
3. Explique la estructura de la materia a nivel atómico y conocerá la interpretación cuántica del enlace químico utilizando la teoría de orbitales moleculares.
4. Maneje programas de cálculo con ordenador para el estudio químico cuántico de moléculas.
5. Explique los aspectos termodinámicos y cinéticos de procesos y reacciones que tienen lugar en las interfases.
6. Sea capaz de utilizar técnicas químico-físicas en estudios relacionados con los contenidos teóricos de Química Física de Superficies.

### 3. Programa de la asignatura

El programa de la asignatura se divide en cuatro bloques:

QC1. Química Cuántica: Fundamentos y átomos

- Introducción a la Mecánica Cuántica
- Fundamentos matemáticos y Postulados
- Estudio mecánico-cuántico de sistemas sencillos
- El átomo de hidrógeno.
- Métodos aproximados. Átomos polielectrónicos. Espectroscopía atómica

## QC2. Química Cuántica: Enlace Químico

- Introducción a la estructura molecular mediante la teoría de orbitales moleculares: el enlace químico

## QS1. Química Física de Superficies: Teoría y problemas

- Química Física de Superficies
- Fenómenos superficiales
- Adsorción gas-sólido y catálisis heterogénea
- La interfase electrizada

## QS2. Prácticas de Química Física de Superficies

### 4. Actividades académicas

El proceso de aprendizaje constará de las siguientes actividades formativas:

1. Adquisición de conocimientos teóricos (6 ECTS) en clases magistrales participativas en grupo grande.
2. Clases de resolución de problemas y seminarios (2 ECTS) en grupos pequeños.
3. Clases prácticas de ordenador (2 ECTS), donde los alumnos trabajarán individualmente.
4. Clases prácticas de laboratorio (1 ECTS). El trabajo se organizará, como norma general, por grupos de dos alumnos.

Para cada bloque temático, las actividades son:

- QC1: 35 h de clase teórica, 14 h de problemas y 4 h de práctica informática.
- QC2: 8 h de clase teórica y 16 h de práctica informática.
- QS1: 17 h de clase teórica y 6 h de problemas.
- QS2: 10 h de prácticas de laboratorio químico.

### 5. Sistema de evaluación

#### Requisitos para aprobar la asignatura

Para superar la asignatura es necesario aprobar independientemente, con una calificación mínima de 5 puntos (sobre 10), cada uno de los cuatro bloques descritos anteriormente: QC1, QC2, QS1 y QS2. Se admitirá la compensación de un único bloque, si tiene una calificación mínima de 4 puntos, siempre que la nota final [ecuación (1)] sea como mínimo de 5 puntos. Las calificaciones de los bloques aprobados o compensables se guardan hasta la 2ª convocatoria.

Es necesario haber completado las prácticas de ordenador para aprobar o compensar los bloques QC1 y QC2. En caso contrario, en los exámenes de 1ª y 2ª convocatoria se podrá hacer una prueba práctica de ordenador.

#### Actividades de evaluación

1. Examen del bloque **QC1**. Se realizará en el periodo de exámenes al finalizar el primer semestre.
2. Examen del bloque **QC2**. Se realizará al terminar las prácticas de ordenador y constará de dos partes: teoría y práctica. Para aprobar o compensar este bloque es necesario obtener una calificación mínima de 3,5 sobre 10 en las preguntas de teoría.
3. Evaluación de las prácticas de laboratorio del bloque **QS2** mediante informes / cuestionarios. Es necesario haber completado las prácticas de laboratorio y entregar todos los informes/cuestionarios requeridos.
4. En la fecha oficial de la 1ª convocatoria se realizará el examen del bloque **QS1**, así como del resto de bloques de la asignatura (**QC1**, **QC2** y **QS2**) que no hayan sido superados previamente. El examen del bloque **QS2** constará de una prueba práctica en el laboratorio y tratamiento de resultados obtenidos. Los estudiantes podrán presentarse a cualquiera de los bloques para subir nota.
5. En la fecha oficial de la 2ª convocatoria se realizará el examen escrito de los bloques **QC1**, **QC2** y **QS1**, junto con un examen de prácticas del bloque **QS2**.

#### Calificación final de la asignatura

La nota final de la asignatura se calculará con la siguiente fórmula:

$$\text{Nota final} = \text{QC1} \cdot 0,52 + \text{QC2} \cdot 0,18 + \text{QS1} \cdot 0,21 + \text{QS2} \cdot 0,09 \text{ (ecuación 1)}$$

Los estudiantes que no se hayan presentado a ningún bloque en la 1ª o 2ª convocatoria figurarán en el acta como *No Presentado*.

Cuando, habiéndose presentado a la 1ª o 2ª convocatoria, no se cumplan los requisitos para aprobar la asignatura, por no haber superado (o compensado) alguno de los bloques, la calificación será *Suspense*, aun cuando la media ponderada aplicando la ecuación 1 sea igual o superior a 5 puntos. En ese caso, en el acta figurará una calificación numérica de 4,5 puntos.