



## 1. DATOS GENERALES

**Asignatura:** QUÍMICA FÍSICA III: MOLÉCULAS POLIATÓMICAS Y ESTAD**Tipología:** OBLIGATORIA**Grado:** 409 - GRADO EN QUÍMICA (2021)**Centro:** 1 - FTAD. CC. Y TECNOLOGÍAS QUÍMICAS CR.**Curso:** 3**Lengua principal de impartición:** Español**Uso docente de otras lenguas:****Página web:** <https://campusvirtual.uclm.es>**Código:** 57319**Créditos ECTS:** 6**Curso académico:** 2023-24**Grupo(s):** 20 23**Duración:** Primer cuatrimestre**Segunda lengua:** Inglés**English Friendly:** S**Bilingüe:** N

Profesor: <b>BERNABE BALLESTEROS RUIZ</b> - Grupo(s): 20 23				
Edificio/Despacho	Departamento	Teléfono	Correo electrónico	Horario de tutoría
Marie Curie, primera planta	QUÍMICA FÍSICA	926052049	bernabe.ballesteros@uclm.es	L, M: 9-11h J: 17-19h.
Profesor: <b>MARIA DEL PILAR MARTIN PORRERO</b> - Grupo(s): 20 23				
Edificio/Despacho	Departamento	Teléfono	Correo electrónico	Horario de tutoría
Marie Curie, 2ª planta	QUÍMICA FÍSICA	926052614	maripilar.martin@uclm.es	Lunes de 11 a 13, Miércoles y jueves de 16 a 18
Profesor: <b>LUCIA SANTOS PEINADO</b> - Grupo(s): 20 23				
Edificio/Despacho	Departamento	Teléfono	Correo electrónico	Horario de tutoría
Edificio Marie Curie/2.05	QUÍMICA FÍSICA	926052480	lucia.santos@uclm.es	Lunes, Miércoles y jueves de 16 a 18

## 2. REQUISITOS PREVIOS

No se han establecido, pero es recomendable haber aprobado la asignatura Química Física II: Introducción a Química Cuántica y a Espectroscopia.

## 3. JUSTIFICACIÓN EN EL PLAN DE ESTUDIOS, RELACIÓN CON OTRAS ASIGNATURAS Y CON LA PROFESIÓN

En esta asignatura se extiende la aplicación de la Mecánica Cuántica al estudio de moléculas poliatómicas con el fin de obtener la estructura molecular y propiedades de las mismas. Ello permite abordar la espectroscopia de moléculas poliatómicas, cumplimentando los contenidos de la "Química Física II: Introducción a Química Cuántica y a Espectroscopia". Así mismo, se presenta la Termodinámica Estadística, que permite relacionar las propiedades moleculares con las propiedades termodinámicas macroscópicas ("Química Física I: Termodinámica Química").

En esta asignatura se utilizan cálculos computacionales que son considerados actualmente como una herramienta imprescindible en las diferentes ramas de la Química.

## 4. COMPETENCIAS DE LA TITULACIÓN QUE LA ASIGNATURA CONTRIBUYE A ALCANZAR

## Competencias propias de la asignatura

Código	Descripción
E07	Relacionar las propiedades macroscópicas con las de átomos, moléculas y compuestos químicos no moleculares.
E08	Conocer los principios de la mecánica cuántica y su aplicación a la estructura de átomos y moléculas.
E15	Saber manejar la instrumentación química estándar y ser capaz de elaborar y gestionar procedimientos normalizados de trabajo en el laboratorio e industria química.
E16	Planificar, diseñar y desarrollar proyectos y experimentos.
G01	Conocer los principios y las teorías de la Química, así como las metodologías y aplicaciones características de la química analítica, química física, química inorgánica y química orgánica, entendiendo las bases físicas y matemáticas que precisan.
G02	Ser capaces de reunir e interpretar datos, información y resultados relevantes, obtener conclusiones y emitir informes razonados en problemas científicos, tecnológicos o de otros ámbitos que requieran el uso de herramientas químicas.
T10	Capacidad de utilización de software específico para química a nivel de usuario.
T11	Capacidad de obtener información bibliográfica, incluyendo recursos en Internet.

## 5. OBJETIVOS O RESULTADOS DE APRENDIZAJE ESPERADOS

## Resultados de aprendizaje propios de la asignatura

## Descripción

Capacidad para buscar, comprender y utilizar de la información bibliográfica y técnica relevante.

Capacidad para comprender y predecir el comportamiento y la reactividad de átomos y moléculas a partir de sus características estructurales, que podrán determinarse a partir de datos espectroscópicos o de cálculos químicocuánticos.

Destreza en el análisis de errores de las magnitudes medidas en el laboratorio y en la utilización de programas informáticos para el tratamiento de datos experimentales.

Destreza en el empleo de programas informáticos de cálculo de propiedades de la materia y de simulación de fenómenos químicos.

Capacidad para resolver problemas químicos aplicando las metodologías propias de la química física.

Capacidad para utilizar de forma correcta el lenguaje científico.

## 6. TEMARIO

**Tema 1: TEORÍA DE GRUPOS Y SIMETRÍA MOLECULAR.** Simetría molecular. Elementos y operaciones de simetría. Grupos puntuales de simetría. Clasificación sistemática de las moléculas. Representaciones reducibles e irreducibles. Tabla de caracteres. Utilización de la tabla de caracteres. Álgebra de operadores de simetría. Representación matricial de las operaciones de simetría. Representación matricial del Hamiltoniano.- Producto directo. Integrales mecánicas y reglas de selección. Aplicaciones.

**Tema 2: ESTRUCTURA DE LAS MOLÉCULAS POLIATÓMICAS.** Diagramas de Orbitales moleculares para moléculas triatómicas AH<sub>2</sub>. Diagramas de Walsh. Introducción a los métodos computacionales: Métodos semiempíricos y Ab-Initio. Método Hückel. Método autoconsistente de Hartree\_Fock. Aproximación CLOA: Ecuaciones de Roothan. Funciones de base ( Funciones de Slater , Funciones Gaussianas, Bases mínimas y bases extendidas). Limitaciones del método de Hartree-Fock. Correlación electrónica.

**Tema 3: ESPECTROSCOPIA DE MOLÉCULAS POLIATÓMICAS.** Espectros de rotación pura. Clasificación por los momentos de inercia. Moléculas lineales (rotor lineal), trompo-esféricas (rotor esférico), trompo-simétricas (rotor simétrico) y trompo-asimétricas (rotor asimétrico). Términos espectrales. Reglas de selección. Transiciones espectrales. Efecto Stark. Métodos experimentales. Aplicaciones de la espectroscopia de rotación. Determinación de estructuras moleculares. Vibración-rotación. Modos normales. Tratamiento mecano-cuántico de las vibraciones moleculares. Términos espectrales. Bandas fundamentales, sobretonos y bandas de combinación. Vibraciones paralelas y perpendiculares. Frecuencias de grupo. Métodos experimentales. Aplicaciones de la espectroscopia infrarroja. Espectros Raman de vibración-rotación de moléculas poliatómicas. Aplicaciones de la espectroscopia Raman. Espectros electrónicos de moléculas poliatómicas. Estados electrónicos. Bandas vibrónicas. Reglas de selección. Estructura de las bandas: Principio de Franck-Condon. Grupos cromóforos. Fluorescencia y fosforescencia. Técnicas y aplicaciones.

**Tema 4: ESPECTROSCOPIAS DE RESONANCIA.** Momento angular de espín y momento magnético. Estados de espín. Interacción espín-campo magnético. Espectroscopia de RMN: Desplazamiento químico y apantallamiento. Acoplamiento espín-espín. Fenómenos de relajación. Métodos experimentales. Aplicaciones de la espectroscopia de RMN. Espectroscopia de RSE.

**Tema 5: TERMODINÁMICA ESTADÍSTICA Y FUNCIONES DE PARTICIÓN.** Estadísticas y funciones de partición. Principio de Boltzman. Partículas discernibles e indiscernibles. Constante de Boltzman. Estadísticas de Maxwell-Boltzmann, Bose-Einstein y Fermi-Dirac. Función de Partición. Separación de las distintas contribuciones a la función de partición molecular. Funciones de partición nuclear, electrónica, traslacional, vibracional y rotacional.

**Tema 6: CÁLCULO DE MAGNITUDES TERMODINÁMICAS.** Función de partición total de un sistema. Funciones termodinámicas en términos de las funciones de partición. Cálculo estadístico de propiedades termodinámicas un sistema (presión, energía interna, capacidad calorífica, entalpía). Cálculo del calor de reacción, entropía de reacción y constante de equilibrio de una reacción. Sistemas de partículas dependientes.

**Tema 7: TERMODINÁMICA ESTADÍSTICA DE GASES REALES.** Gases reales. Factor de compresibilidad. Ecuaciones de estado de un gas real. El estado crítico. Datos críticos y ecuaciones de estado. Ley de los estados correspondientes. Fuerzas intermoleculares: Potencial de esferas rígidas, pozo cuadrado, potencial de Lennard-Jones. Ecuación del virial. Segundo coeficiente del virial. Interpretación molecular del comportamiento de gases reales.

**Tema 8: TERMODINÁMICA ESTADÍSTICA DE ESTADOS CONDENSADOS: ESTADO SÓLIDO Y LÍQUIDO.** Tipos de sólidos. Cálculo teórico de la energía de cohesión. Radios iónicos y covalentes. Teoría de Bandas. Mecánica estadística de los cristales: Teorías de Einstein y Debye. Estado líquido: Función de distribución radial. Teoría de líquidos: Métodos de Monte Carlo y Dinámica Molecular.

**Tema 9: PRÁCTICAS:** Introducción a la Química computacional. Métodos semiempíricos. Mecánica Molecular. Cálculos ab-initio. Cálculos MP. Cálculos DFT. Cálculo de propiedades moleculares, determinación de estructuras de equilibrio, barreras rotacionales, orbitales moleculares, etc. Espectros UV-vis e IR de moléculas poliatómicas. Experimentos con gases reales: Manejo de gases a alta presión. Punto crítico. Determinación del 2º coeficiente del virial.

## 7. ACTIVIDADES O BLOQUES DE ACTIVIDAD Y METODOLOGÍA

Actividad formativa	Metodología	Competencias relacionadas (para títulos anteriores a RD 822/2021)	ECTS	Horas	Ev	Ob	Descripción
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL]	Método expositivo/Lección magistral	E07 E08 G01 T10 T11	0.88	22	N	-	Clases de teoría dedicadas a explicar los contenidos del temario.
Prácticas de laboratorio [PRESENCIAL]	Prácticas	E07 E08 E15 E16 G02 T10	0.6	15	S	S	Realización de prácticas en el laboratorio durante 3 días
Talleres o seminarios [PRESENCIAL]	Seminarios	E07 E08 G02 T10 T11	0.56	14	S	N	Se resolverán y aclararán dudas de seminarios y problemas previamente planteados y trabajados de forma autónoma por los alumnos. Puntualmente se trabajará individualmente en el aula un problema propuesto
Elaboración de memorias de Prácticas [AUTÓNOMA]	Trabajo autónomo	G02	0.32	8	S	S	Estudio de los guiones y elaboración de un informe con los resultados obtenidos en las prácticas de laboratorio.
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA]	Combinación de métodos	E07 E08 E16 G01 G02 T10 T11	3.28	82	N	-	Resolución autónoma de los problemas o seminarios planteados y estudio de los contenidos teóricos del programa.
Prueba parcial [PRESENCIAL]	Pruebas de evaluación	G01	0.06	1.5	S	N	Examen parcial escrito de los primeros 4 temas.
Prueba final [PRESENCIAL]	Pruebas de evaluación	G01	0.1	2.5	S	S	Examen parcial de la segunda parte del temario con la posibilidad de recuperar la primera parte/examen final
Prácticas en aulas de ordenadores [PRESENCIAL]	Prácticas	E08 G02 T10	0.12	3	S	S	Se realizara un supuesto practico empleando la metodología y el software adecuado y guiado por el profesor.
Tutorías de grupo [PRESENCIAL]	Trabajo en grupo	G02 T11	0.08	2	S	N	Se planteará un problema o caso práctico para resolverlo en grupo durante la hora de clase
<b>Total:</b>			<b>6</b>	<b>150</b>			
<b>Créditos totales de trabajo presencial: 2.4</b>							<b>Horas totales de trabajo presencial: 60</b>
<b>Créditos totales de trabajo autónomo: 3.6</b>							<b>Horas totales de trabajo autónomo: 90</b>

Ev: Actividad formativa evaluable

Ob: Actividad formativa de superación obligatoria (Será imprescindible su superación tanto en evaluación continua como no continua)

8. CRITERIOS DE EVALUACIÓN Y VALORACIONES			
Sistema de evaluación	Evaluación continua	Evaluación no continua*	Descripción
Realización de actividades en aulas de ordenadores	5.00%	5.00%	Seguimiento en el aula de ordenadores del trabajo realizado en el desarrollo de la parte experimental y del proceso de análisis de los resultados.
Realización de prácticas en laboratorio	10.00%	10.00%	Realización de cuestionario previo tipo test. Seguimiento en el laboratorio del trabajo realizado en el desarrollo de la parte experimental y del proceso de análisis de los resultados.
Elaboración de memorias de prácticas	5.00%	5.00%	Revisión de informes de resultados y conclusiones.
Resolución de problemas o casos	20.00%	0.00%	Seguimiento en clase de la resolución de los problemas planteados en el seminario. Examen con cuestiones y problemas sobre los contenidos impartidos en la asignatura
Pruebas parciales	30.00%	0.00%	Examen con cuestiones y problemas sobre los contenidos impartidos en la asignatura.
Prueba final	30.00%	80.00%	Examen con cuestiones y problemas sobre los contenidos impartidos en la asignatura. Será de 60 % cuando la prueba implique la evaluación de todo el temario.
<b>Total:</b>	<b>100.00%</b>	<b>100.00%</b>	

\* En **Evaluación no continua** se deben definir los porcentajes de evaluación según lo dispuesto en el art. 4 del Reglamento de Evaluación del Estudiante de la UCLM, que establece que debe facilitarse a los estudiantes que no puedan asistir regularmente a las actividades formativas presenciales la superación de la asignatura, teniendo derecho (art. 12.2) a ser calificado globalmente, en 2 convocatorias anuales por asignatura, una ordinaria y otra extraordinaria (evaluándose el 100% de las competencias).

#### Criterios de evaluación de la convocatoria ordinaria:

##### Evaluación continua:

- Examen escrito con cuestiones y problemas sobre los contenidos impartidos en la asignatura (60 % de la nota). Este porcentaje puede repartirse en dos exámenes parciales (examen parcial y prueba final) o en un examen final (prueba final).
- Evaluación continua de trabajo en laboratorio o aula de ordenadores, incluyendo el proceso de análisis de datos, elaboración de un informe sobre los resultados y conclusiones, así como las cuestiones tipo test (20%).
- Evaluación continua sobre aprendizaje basado en la resolución de problemas en las horas de seminario(20%). Se pedirá al alumno entregar ejercicios resueltos, resolver diferentes cuestiones relacionadas con la materia, resolución de casos prácticos...
- Para aplicar la evaluación continua deben tener al menos un 4 en las actividades evaluables.
- Para superar la asignatura es necesario obtener una calificación mínima de 5 una vez aplicados los porcentajes de evaluación de cada actividad
- No podrá superarse la asignatura si no se realizan las prácticas de laboratorio. Son obligatorias

##### Evaluación no continua:

- Examen escrito con cuestiones y problemas sobre los contenidos impartidos en la asignatura incluidos cuestiones sobre las prácticas (80 % de la nota). Este examen será diferente al que se realiza para los que siguen la evaluación continua con el objetivo de evaluar todos las competencias propias de la asignatura.
- 2-20% la nota de las prácticas (trabajo en el laboratorio, informe del trabajo realizado y resultados de los cuestionarios tipo test).
- No podrá superarse la asignatura si no se realizan las prácticas de laboratorio. Son obligatorias

#### Particularidades de la convocatoria extraordinaria:

- Examen con cuestiones y problemas sobre los contenidos impartidos en la asignatura (60 % de la nota).
- Evaluación continua de trabajo en laboratorio o aula de ordenadores, incluyendo el proceso de análisis de datos, elaboración de un informe sobre los resultados y conclusiones, así como las cuestiones tipo test (20%).
- Evaluación continua sobre aprendizaje basado en problemas en las horas de seminario(20%). Se pedirá al alumno entregar ejercicios resueltos, resolver diferentes cuestiones relacionadas con la materia, resolución de casos prácticos...

La nota de laboratorio se conserva para todos los alumnos. Si el laboratorio se ha suspendido en la convocatoria ordinaria, la convocatoria extraordinaria incluirá cuestiones/actividades prácticas.

#### Particularidades de la convocatoria especial de finalización:

- Examen escrito con cuestiones y problemas sobre los contenidos impartidos en la asignatura incluidos cuestiones sobre las prácticas (80 % de la nota). Este examen será diferente al que se realiza para los que siguen la evaluación continua con el objetivo de evaluar todos las competencias propias de la asignatura.
- 2-20% la nota de las prácticas (trabajo en el laboratorio, informe del trabajo realizado y resultados de los cuestionarios tipo test).
- El alumno debe tener superado el laboratorio.

9. SECUENCIA DE TRABAJO, CALENDARIO, HITOS IMPORTANTES E INVERSIÓN TEMPORAL	
No asignables a temas	
Horas	Suma horas
<b>Tema 1 (de 9): TEORÍA DE GRUPOS Y SIMETRÍA MOLECULAR. Simetría molecular. Elementos y operaciones de simetría. Grupos puntuales de simetría. Clasificación sistemática de las moléculas. Representaciones reducibles e irreducibles. Tabla de caracteres. Utilización de la tabla de caracteres. Algebra de operadores de simetría. Representación matricial de las operaciones de simetría. Representación matricial del Hamiltoniano.- Producto directo. Integrales mecanocuánticas y reglas de selección. Aplicaciones.</b>	
<b>Actividades formativas</b>	<b>Horas</b>
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	2
Talleres o seminarios [PRESENCIAL][Seminarios]	1
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Combinación de métodos]	6
Prueba parcial [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	.5
<b>Periodo temporal: Septiembre</b>	
<b>Tema 2 (de 9): ESTRUCTURA DE LAS MOLÉCULAS POLIATÓMICAS. Diagramas de Orbitales moleculares para moléculas triatómicas AH2. Diagramas de Walsh. Introducción a los métodos computacionales: Métodos semiempíricos y Ab-Initio. Método Hückel. Método autoconsistente de Hartree_Fock. Aproximación CLOA: Ecuaciones de Roothan. Funciones de base ( Funciones de Slater , Funciones Gaussianas, Bases mínimas y bases extendidas). Limitaciones del método de Hartree-Fock. Correlación electrónica.</b>	

Actividades formativas	Horas
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	5
Talleres o seminarios [PRESENCIAL][Seminarios]	2
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Combinación de métodos]	13.75
Prueba parcial [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	.5
<b>Periodo temporal:</b> septiembre	
<b>Tema 3 (de 9): ESPECTROSCOPIA DE MOLÉCULAS POLIATÓMICAS. Espectros de rotación pura. Clasificación por los momentos de inercia. Moléculas lineales (rotor lineal), trompo-esféricas (rotor esférico), trompo-simétricas (rotor simétrico) y trompo-asimétricas (rotor asimétrico). Términos espectrales. Reglas de selección. Transiciones espectrales. Efecto Stark. Métodos experimentales. Aplicaciones de la espectroscopia de rotación. Determinación de estructuras moleculares. Vibración-rotación. Modos normales. Tratamiento mecano-cuántico de las vibraciones moleculares. Términos espectrales. Bandas fundamentales, sobretonos y bandas de combinación. Vibraciones paralelas y perpendiculares. Frecuencias de grupo. Métodos experimentales. Aplicaciones de la espectroscopia infrarroja. Espectros Raman de vibración-rotación de moléculas poliatómicas. Aplicaciones de la espectroscopia Raman. Espectros electrónicos de moléculas poliatómicas. Estados electrónicos. Bandas vibrónicas. Reglas de selección. Estructura de las bandas: Principio de Franck-Condon. Grupos cromóforos. Fluorescencia y fosforescencia. Técnicas y aplicaciones.</b>	
Actividades formativas	Horas
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	5
Talleres o seminarios [PRESENCIAL][Seminarios]	2
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Combinación de métodos]	13.75
Prueba parcial [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	.5
<b>Periodo temporal:</b> octubre	
<b>Tema 4 (de 9): ESPECTROSCOPIAS DE RESONANCIA. Momento angular de espín y momento magnético. Estados de espín. Interacción espín-campo magnético. Espectroscopia de RMN: Desplazamiento químico y apantallamiento. Acoplamiento espín-espín. Fenómenos de relajación. Métodos experimentales. Aplicaciones de la espectroscopia de RMN. Espectroscopia de RSE.</b>	
Actividades formativas	Horas
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	1
Talleres o seminarios [PRESENCIAL][Seminarios]	1
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Combinación de métodos]	4
<b>Periodo temporal:</b> octubre	
<b>Tema 5 (de 9): TERMODINÁMICA ESTADÍSTICA Y FUNCIONES DE PARTICIÓN. Estadísticas y funciones de partición. Principio de Boltzman. Partículas discernibles e indiscernibles. Constante de Boltzman. Estadísticas de Maxwell-Boltzmann, Bose-Einstein y Fermi-Dirac. Función de Partición. Separación de las distintas contribuciones a la función de partición molecular. Funciones de partición nuclear, electrónica, traslacional, vibracional y rotacional.</b>	
Actividades formativas	Horas
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	2.5
Talleres o seminarios [PRESENCIAL][Seminarios]	2
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Combinación de métodos]	9.75
Prueba final [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	.5
Tutorías de grupo [PRESENCIAL][Trabajo en grupo]	.5
<b>Periodo temporal:</b> octubre-noviembre	
<b>Tema 6 (de 9): CÁLCULO DE MAGNITUDES TERMODINÁMICAS. Función de partición total de un sistema. Funciones termodinámicas en términos de las funciones de partición. Cálculo estadístico de propiedades termodinámicas un sistema (presión, energía interna, capacidad calorífica, entalpia). Cálculo del calor de reacción, entropía de reacción y constante de equilibrio de una reacción. Sistemas de partículas dependientes.</b>	
Actividades formativas	Horas
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	2.5
Talleres o seminarios [PRESENCIAL][Seminarios]	3
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Combinación de métodos]	9.5
Prueba parcial [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	.33
Tutorías de grupo [PRESENCIAL][Trabajo en grupo]	.5
<b>Periodo temporal:</b> noviembre	
<b>Tema 7 (de 9): TERMODINÁMICA ESTADÍSTICA DE GASES REALES. Gases reales. Factor de compresibilidad. Ecuaciones de estado de un gas real. El estado crítico. Datos críticos y ecuaciones de estado. Ley de los estados correspondientes. Fuerzas intermoleculares: Potencial de esferas rígidas, pozo cuadrado, potencial de Lennard-Jones. Ecuación del virial. Segundo coeficiente del virial. Interpretación molecular del comportamiento de gases reales.</b>	
Actividades formativas	Horas
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	2.5
Talleres o seminarios [PRESENCIAL][Seminarios]	2
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Combinación de métodos]	9.75
Prueba final [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	.5
Tutorías de grupo [PRESENCIAL][Trabajo en grupo]	.5
<b>Periodo temporal:</b> noviembre	
<b>Tema 8 (de 9): TERMODINÁMICA ESTADÍSTICA DE ESTADOS CONDENSADOS: ESTADO SÓLIDO Y LÍQUIDO. Tipos de sólidos. Cálculo teórico de la energía de cohesión. Radios iónicos y covalentes. Teoría de Bandas. Mecánica estadística de los cristales: Teorías de Einstein y Debye. Estado líquido: Función de distribución radial. Teoría de líquidos: Métodos de Monte Carlo y Dinámica Molecular.</b>	
Actividades formativas	Horas
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	1.5
Talleres o seminarios [PRESENCIAL][Seminarios]	1
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Combinación de métodos]	6
Prueba final [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	.5
Tutorías de grupo [PRESENCIAL][Trabajo en grupo]	.5
<b>Periodo temporal:</b> diciembre	
<b>Tema 9 (de 9): PRÁCTICAS: Introducción a la Química computacional. Métodos semiempíricos. Mecánica Molecular. Cálculos ab-initio. Cálculos MP. Cálculos DFT. Cálculo de propiedades moleculares, determinación de estructuras de equilibrio, barreras rotacionales, orbitales moleculares, etc. Espectros UV-vis e IR de moléculas poliatómicas. Experimentos con gases reales: Manejo de gases a alta presión. Punto crítico. Determinación del 2º</b>	

<b>coeficiente del virial.</b>	
<b>Actividades formativas</b>	<b>Horas</b>
Prácticas de laboratorio [PRESENCIAL][Prácticas]	18
Elaboración de memorias de Prácticas [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	8
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Combinación de métodos]	9.5
Prueba final [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	.67
<b>Periodo temporal:</b> octubre-diciembre	
<b>Actividad global</b>	
<b>Actividades formativas</b>	<b>Suma horas</b>
Tutorías de grupo [PRESENCIAL][Trabajo en grupo]	2
Prácticas de laboratorio [PRESENCIAL][Prácticas]	18
Talleres o seminarios [PRESENCIAL][Seminarios]	14
Elaboración de memorias de Prácticas [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	8
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Combinación de métodos]	82
Prueba parcial [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	1.83
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	22
Prueba final [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	2.17
<b>Total horas: 150</b>	

<b>10. BIBLIOGRAFÍA, RECURSOS</b>						
<b>Autor/es</b>	<b>Título/Enlace Web</b>	<b>Editorial</b>	<b>Población</b>	<b>ISBN</b>	<b>Año</b>	<b>Descripción</b>
Atkins, P. W. (1940-)	Atkins química física	Medica Panamericana		978-950-06-1248-7	2008	
Atkins, P. W. (1940-)	Molecular quantum mechanics	Oxford University press		0-19-855947-X	2001	
Bertrán Rusca y J. Núñez Delgado (coord.).	Problemas de Química Física	Delta Publicaciones,		84-96477-48-7	2007	
Engel, Thomas	Química física	Pearson-Addison Wesley		84-7829-077-X	2006	
Levine, Ira N.	Fisicoquímica	McGraw Hill		84-481-4005-2	2004	
Levine, Ira N.	Problemas de fisicoquímica	McGraw Hill		84-481-9833-6	2005	
McQuarrie, Donald A. (Donald Allan)	Physical chemistry : a molecular approach	University Science Books		978-0-935702-99-6	1997	
Hollas, J. Michael	Modern spectroscopy /	John Wiley & Sons,		978-0-470-84416-8	2010	