

Facultad de Ciencias

## GUÍA DOCENTE DE LA ASIGNATURA

G2001 - Estructura de Moléculas y Sólidos

Doble Grado en Física y Matemáticas  
Obligatoria. Curso 3

Grado en Física  
Obligatoria. Curso 3

Curso Académico 2022-2023

**1. DATOS IDENTIFICATIVOS**

Título/s	Doble Grado en Física y Matemáticas Grado en Física		Tipología y Curso	Obligatoria. Curso 3 Obligatoria. Curso 3
Centro	Facultad de Ciencias			
Módulo / materia	MATERIA FÍSICA CUÁNTICA Y ESTRUCTURA DE LA MATERIA MÓDULO CENTRAL			
Código y denominación	G2001 - Estructura de Moléculas y Sólidos			
Créditos ECTS	6	Cuatrimestre	Cuatrimestral (1)	
Web				
Idioma de impartición	Español	English friendly	No	Forma de impartición Presencial

Departamento	DPTO. CIENCIAS DE LA TIERRA Y FISICA DE LA MATERIA CONDENSADA			
Profesor responsable	PABLO GARCIA FERNANDEZ			
E-mail	pablo.garciafernandez@unican.es			
Número despacho	Facultad de Ciencias. Planta: + 2. DESPACHO PROFESORES (2007)			
Otros profesores				

**2. CONOCIMIENTOS PREVIOS**

G35 Matemáticas I: Álgebra Lineal y Geometría, G36 Matemáticas II: Cálculo Diferencial, G37 Matemáticas III: Cálculo Integral, G49 Mecánica Clásica y Relatividad, G51 Electricidad y Magnetismo, G53 Termodinámica, G55 Física Cuántica y Estructura de la Materia I.

### 3. COMPETENCIAS GENÉRICAS Y ESPECÍFICAS DEL PLAN DE ESTUDIOS TRABAJADAS

#### Competencias Genéricas

(Conocimiento): que los estudiantes hayan demostrado poseer y comprender conocimientos en un área de estudio que parte de la base de la educación secundaria general, y se suele encontrar a un nivel que, si bien se apoya en libros de texto avanzados, incluye también algunos aspectos que implican conocimientos procedentes de la vanguardia de su campo de estudio.

(Aplicación): que los estudiantes sepan aplicar sus conocimientos a su trabajo o vocación de una forma profesional y posean las competencias que suelen demostrarse por medio de la elaboración y defensa de argumentos y la resolución de problemas dentro de su área de estudio.

(Análisis): que los estudiantes tengan la capacidad de reunir e interpretar datos relevantes (normalmente dentro de su área de estudio) para emitir juicios que incluyan una reflexión sobre temas relevantes de índole social, científica o ética.

#### Competencias Específicas

(Conocimiento): conocer y comprender los fenómenos físicos, las teorías, leyes y modelos que los rigen, incluyendo su dominio de aplicación y su formulación en lenguaje matemático.

(Aplicación): saber utilizar los métodos matemáticos, analíticos y numéricos básicos, para la descripción del mundo físico, incluyendo en particular la elaboración de teorías y modelos y el planteamiento de medidas experimentales.

(Análisis): Entender el papel del método científico en la discusión de teorías y modelos, y ser capaz de plantear y realizar un experimento específico, analizando los resultados del mismo con la precisión requerida.

(Aprendizaje): saber acceder a la información necesaria para abordar un trabajo o estudio utilizando las fuentes adecuadas, incluyendo literatura científico-técnica en inglés, y otros recursos on-line. Planificar y documentar adecuadamente esta tarea.

(Iniciativa): ser capaz de trabajar de modo autónomo, mostrando iniciativa propia y sabiendo organizarse para cumplir los plazos marcados. Aprender a trabajar en equipo, contribuyendo constructivamente y asumiendo responsabilidades y liderazgo.

#### 3.1 RESULTADOS DE APRENDIZAJE

- Comprender la relevancia de la física cuántica en la explicación microscópica de fenómenos físicos.
- Entender la visión cuántica de la radiación electromagnética y de su interacción con la materia.
- Comprender la importancia de la simetría los sistemas cuánticos.
- Conocer las técnicas espectroscópicas básicas para la caracterización estructural y dinámica de moléculas.
- Saber analizar la estructura de los sólidos cristalinos, y comprender su estabilidad y propiedades físicas asociadas.
- Conocer los modelos sencillos de la dinámica vibracional en cristales y sus propiedades asociadas.
- Entender los resultados experimentales en sólidos y obtener parámetros vibracionales, electrónicos y magnéticos desde la comprensión de modelos básicos.

#### 4. OBJETIVOS

Adquirir una visión global de la constitución microscópica de la materia, partiendo de la estructura electrónica de los átomos, para entender por qué se agregan para formar moléculas y sólidos.

Entender el modelo de partícula independiente en moléculas y la necesidad de la antisimetrización de la función de onda, las ecuaciones de Hartree-Fock y el concepto de energía de intercambio

Entender el origen microscópico del enlace molecular y de las fuerzas intermoleculares.

Comprender la importancia de la simetría en los sistemas cuánticos.

Conocer técnicas espectroscópicas básicas y analizar la dinámica vibracional y rotacional de moléculas

Ser capaz de analizar y entender el origen microscópico de muchas propiedades macroscópicas relevantes.

Adquirir y comprender los conocimientos básicos de la estructura de los sólidos cristalinos, sus simetrías y aparición de curvas de dispersión.

Comprender los conceptos y fundamentos de las teorías y modelos de la estructura de la materia, sus aproximaciones y limitaciones, así como los órdenes de magnitud de las propiedades analizadas.

Adquirir los fundamentos de relevantes técnicas de caracterización de materiales (sólidos, líquidos y gases), prestando una atención especial a la difracción de rayos X en sólidos cristalinos y las técnicas espectroscópicas fundamentales.

#### 5. MODALIDADES ORGANIZATIVAS Y MÉTODOS DOCENTES

ACTIVIDADES	HORAS DE LA ASIGNATURA
<b>ACTIVIDADES PRESENCIALES</b>	
HORAS DE CLASE (A)	
- Teoría (TE)	36
- Prácticas en Aula (PA)	24
- Prácticas de Laboratorio Experimental (PLE)	
- Prácticas de Laboratorio en Ordenador (PLO)	
- Prácticas Clínicas (CL)	
Subtotal horas de clase	60
<b>ACTIVIDADES DE SEGUIMIENTO (B)</b>	
- Tutorías (TU)	10
- Evaluación (EV)	10
Subtotal actividades de seguimiento	20
<b>Total actividades presenciales (A+B)</b>	<b>80</b>
<b>ACTIVIDADES NO PRESENCIALES</b>	
Trabajo en grupo (TG)	
Trabajo autónomo (TA)	70
Tutorías No Presenciales (TU-NP)	
Evaluación No Presencial (EV-NP)	
<b>Total actividades no presenciales</b>	<b>70</b>
<b>HORAS TOTALES</b>	<b>150</b>

**6. ORGANIZACIÓN DOCENTE**

CONTENIDOS		TE	PA	PLE	PLO	CL	TU	EV	TG	TA	TU-NP	EV-NP	Semana
1	Estructura de moléculas y sólidos, cristalografía	5,00	3,00	0,00	0,00	0,00	2,00	0,00	0,00	10,00	0,00	0,00	1-2
2	Red recíproca y rayos X	5,00	3,00	0,00	0,00	0,00	1,00	2,00	0,00	7,00	0,00	0,00	3-4
3	Estructura electrónica de moléculas	3,00	2,00	0,00	0,00	0,00	1,00	0,00	0,00	7,00	0,00	0,00	5
4	Simetría	5,00	3,00	0,00	0,00	0,00	2,00	0,00	0,00	10,00	0,00	0,00	6-7
5	Moléculas diatómicas	4,00	3,00	0,00	0,00	0,00	1,00	0,00	0,00	10,00	0,00	0,00	8-9
6	Moléculas poliatómicas y enlace intermolecular	4,00	3,00	0,00	0,00	0,00	1,00	2,00	0,00	7,00	0,00	0,00	10-11
7	Espectroscopia: Rotaciones, vibraciones y transiciones electrónicas	5,00	3,00	0,00	0,00	0,00	1,00	2,00	0,00	9,00	0,00	0,00	12-13
8	Vibraciones en sólidos y propiedades térmicas	5,00	4,00	0,00	0,00	0,00	1,00	4,00	0,00	10,00	0,00	0,00	14-15
<b>TOTAL DE HORAS</b>		<b>36,00</b>	<b>24,00</b>	<b>0,00</b>	<b>0,00</b>	<b>0,00</b>	<b>10,00</b>	<b>10,00</b>	<b>0,00</b>	<b>70,00</b>	<b>0,00</b>	<b>0,00</b>	

Esta organización tiene carácter orientativo.

TE	Horas de teoría
PA	Horas de prácticas en aula
PLE	Horas de prácticas de laboratorio experimental
PLO	Horas de prácticas de laboratorio en ordenador
CL	Horas de prácticas clínicas
TU	Horas de tutoría
EV	Horas de evaluación
TG	Horas de trabajo en grupo
TA	Horas de trabajo autónomo
TU-NP	Tutorías No Presenciales
EV-NP	Evaluación No Presencial

7. MÉTODOS DE LA EVALUACIÓN				
Descripción	Tipología	Eval. Final	Recuper.	%
Examen parcial parte 1	Examen escrito	No	Sí	30,00
Calif. mínima	4,00			
Duración				
Fecha realización	Octubre			
Condiciones recuperación	Convocatoria ordinaria			
Observaciones				
Examen parcial parte 2	Examen escrito	No	Sí	30,00
Calif. mínima	4,00			
Duración				
Fecha realización	Noviembre			
Condiciones recuperación	Convocatoria ordinaria			
Observaciones				
Entregable espectroscopia	Trabajo	No	No	10,00
Calif. mínima	0,00			
Duración				
Fecha realización	Diciembre			
Condiciones recuperación				
Observaciones				
Evaluación espectroscopía	Examen escrito	Sí	Sí	30,00
Calif. mínima	2,50			
Duración				
Fecha realización	Convocatoria ordinaria			
Condiciones recuperación	Convocatoria extraordinaria			
Observaciones				
<b>TOTAL</b>				<b>100,00</b>
<b>Observaciones</b>				
- 1er parcial (30% elimina materia, compensable a partir de 4): Octubre. Estructura de moléculas y sólidos, cristalografía y red recíproca				
- 2º parcial (30% elimina materia, compensable a partir de 4): Noviembre: Estructura electrónica de moléculas				
- Entregable espectroscopia: 10% (Diciembre)				
- Ordinaria: Evaluación obligatoria de espectroscopia (30%, compensable a partir de 2.5) + recuperación parciales anteriores				
- Extraordinaria: Examen único				
<b>Criterios de evaluación para estudiantes a tiempo parcial</b>				
En la medida de lo posible, y de acuerdo con el alumnado, se intentará facilitar el seguimiento de la asignatura				

## 8. BIBLIOGRAFÍA Y MATERIALES DIDÁCTICOS

### BÁSICA

P. W. Atkins, Molecular Quantum Mechanics (Oxford U.P., 1993).  
 M. T. Dove, Structure and Dynamics. An Atomic View of Materials (Oxford U.P., 2003).  
 N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, Solid State Physics (Holt, Rhinehart and Winston, 1976)

### Complementaria

F. Jensen, Introduction to computational chemistry (Wiley, 1999)  
 C. Kittel. Introducción a la Física del Estado Sólido (Reverté, 1993)  
 [C. Kittel, Introduction to solid state physics. 8th Ed.. (Wiley, 1976)]  
 B.H. Bransden, C.J. Joachain, The Physics of Atoms and Molecules (Longman, 2003)  
 O. Mó y M. Yañez, Enlace Químico y Estructura Molecular (J.M. Bosch, Barcelona, 2000).  
 P. W. Atkins, Physical Chemistry (Oxford U.P., 1996).  
 C. Hammond, The Basic of Crystallography and Diffraction (Oxford U.P., 1997).

## 9. SOFTWARE

PROGRAMA / APLICACIÓN	CENTRO	PLANTA	SALA	HORARIO
<a href="https://www.cryst.ehu.es/">https://www.cryst.ehu.es/</a>				

## 10. COMPETENCIAS LINGÜÍSTICAS

- Comprensión escrita                       Comprensión oral  
 Expresión escrita                               Expresión oral  
 Asignatura íntegramente desarrollada en inglés

### Observaciones