

DATOS DE LA ASIGNATURA								
Titulación:	Licenciatura en Ciencias Químicas				Plan:		2004	
Asignatura:	Física Molecular				Código:			
Créditos Totales LRU:	4.5	Teóricos:	4.5	Prácticos:				
Créditos Totales ECTS		Teóricos:		Prácticos:				
Descriptores (BOE):								
Departamento:	Física Aplicada	Área de Conocimiento:			Física Aplicada			
Tipo: (troncal/obligatoria/optativa)	Optativa	Curso:	5º	Cuatrimestre:		2º	Ciclo:	2º

PROFESOR/ES	E-mail	Ubicación	Teléfono
Francisco Pérez Bernal (responsable)	<a href="mailto:francisco.perez@dfaie.uhu.es">francisco.perez@dfaie.uhu.es</a>	Fac. CCEE 4.1.9	959219789
Miguel Carvajal Zaera	<a href="mailto:miguel.carvajal@dfa.uhu.es">miguel.carvajal@dfa.uhu.es</a>	Fac. CCEE 4.1.18	959219792
<b>Dirección página WEB de la asignatura</b>	<a href="http://moodle.uhu.es">http://moodle.uhu.es</a> <a href="http://www.uhu.es/gem/docencia.php">http://www.uhu.es/gem/docencia.php</a>		

## DOCENCIA EN EL CURSO 2012-2013

<b>Contexto de la asignatura</b>	<p>La asignatura "Física Molecular" tiene dos objetivos básicos, el primero de carácter fundamental y el segundo de carácter aplicado.</p> <p>El primer objetivo de la asignatura, de carácter fundamental, es conseguir que el alumno refuerce los conocimientos adquiridos a lo largo de la carrera en el campo de la Física Cuántica, la Espectroscopía Atómica y Molecular. Estos son campos de gran importancia en la formación del licenciado en Ciencias Químicas y se pretende enriquecer la formación de los alumnos ofreciéndoles formación en este campo desde una perspectiva que huye del formalismo riguroso y centrada en la resolución de problemas prácticos.</p> <p>El punto anterior está íntimamente relacionado con el segundo objetivo de este curso, que es presentar a los alumnos una serie de herramientas informáticas que les servirán para tratar los problemas prácticos que se les presentarán a lo largo del curso. Estas herramientas no sólo permitirán a los alumnos resolver los problemas que se les vayan planteando sino que se pretende les sean de utilidad en el futuro.</p> <p>En concreto, se persigue formar a los alumnos de modo que sean capaces de enfrentarse a diferentes problemas y sepan qué tipo de aplicación o lenguaje de programación es el más adecuado para cada problema. Además se intentará en el curso que el alumno sea capaz de abstraer el núcleo del problema, así como las posibles formas de resolverlo. Por último se les presentarán diferentes programas tales como herramientas de cálculo, aplicaciones para la representación de datos y se les proporcionarán rudimentos de programación y de algunos lenguajes de programación útiles en ámbito científico. Todo ello se llevará a cabo en el curso de forma muy aplicada y haciendo uso de aplicaciones de código abierto. El uso de aplicaciones de código abierto en el campo de la ciencia está adquiriendo una enorme importancia, a lo que hay que añadir una apuesta decidida por parte de la Universidad y de la Junta de Andalucía para su uso generalizado. Por ello, se formará a los alumnos como usuarios del sistema operativo GNU/Linux, dando además la formación básica en administración de sistemas necesaria para conseguir los objetivos del curso.</p>
<b>Objetivo General de la Asignatura:</b>	<p>Conocimiento con un nivel intermedio de la estructura atómica y molecular y del uso de herramientas informáticas para la resolución de problemas.</p>
<b>Competencias y destrezas teórico-prácticas a adquirir por el alumno:</b>	<p>Soltura en el manejo del sistema operativo GNU/Linux.</p> <p>Conocimientos básicos de programación aplicada a diversos problemas de interés científico.</p> <p>Conocimiento de herramientas informáticas para el tratamiento y presentación de datos.</p> <p>Resolución de problemas en estructura atómica y molecular mediante el uso de herramientas informáticas.</p>
<b>Contribución al desarrollo de habilidades y destrezas Genéricas:</b>	<p>Habilidad para trabajar de forma autónoma.</p> <p>Resolución de problemas y aplicación de la teoría a problemas prácticos.</p> <p>Habilidades aplicables a la investigación.</p> <p>Capacidad de aprender.</p> <p>Capacidad de crítica y autocrítica.</p>
<b>Prerrequisitos:</b>	<p>Esta asignatura no precisa de ningún prerrequisito académico.</p>
<b>Recomendaciones</b>	<p>Sin ser necesario, sería conveniente para la matriculación en este curso disponer de unos conocimientos adecuados de Matemáticas, Física y Química Física. Por ello se recomienda tener aprobados los cursos siguientes:</p> <p><u>Primer curso:</u> Cálculo, Álgebra, Física, <a href="#">Enlace Químico y Estructura de la Materia</a></p> <p><u>Segundo curso:</u> <a href="#">Estadística y Programación</a></p> <p><u>Tercer curso:</u> <a href="#">Química Física, Química Cuántica y Simetría y Topología Molecular</a></p> <p><u>De forma más general se recomienda:</u></p> <p>Asistir regularmente a las clases teóricas, y especialmente a las que se impartan en el aula de informática.</p> <p>Participar en las actividades académicas dirigidas y hacer uso de las tutorías.</p>

## DOCENCIA EN EL CURSO 2011-2012



	<div><div>Facultad de</div><div>Ciencias Experimentales</div></div>																												
Bloques Temáticos	Bloque 1 Introducción al sistema operativo GNU/Linux Bloque 2 Repaso de Teoría de Grupos y Mecánica Cuántica Bloque 3 Lenguaje de programación FORTRAN90 Bloque 4 Espectroscopía Atómica y Molecular																												
Competencias a adquirir por bloques temáticos:	<table><tr><td></td><td>Bloque I</td><td>Bloque II</td><td>Bloque III</td><td>Bloque IV</td></tr><tr><td>Conocimiento y comprensión de conceptos básicos</td><td>X</td><td>X</td><td>X</td><td>X</td></tr><tr><td>Planificación del trabajo</td><td>X</td><td>X</td><td>X</td><td>X</td></tr><tr><td>Análisis y discusión de datos</td><td>X</td><td></td><td>X</td><td>X</td></tr><tr><td>Resolución de problemas</td><td></td><td>X</td><td>X</td><td>X</td></tr></table>					Bloque I	Bloque II	Bloque III	Bloque IV	Conocimiento y comprensión de conceptos básicos	X	X	X	X	Planificación del trabajo	X	X	X	X	Análisis y discusión de datos	X		X	X	Resolución de problemas		X	X	X
	Bloque I	Bloque II	Bloque III	Bloque IV																									
Conocimiento y comprensión de conceptos básicos	X	X	X	X																									
Planificación del trabajo	X	X	X	X																									
Análisis y discusión de datos	X		X	X																									
Resolución de problemas		X	X	X																									
Temario y Planificación Temporal:	<i>Tema 1.- Conceptos básicos de GNU/Linux. 3h</i> <i>Tema 2.- UNIX básico. 4h</i> <i>Tema 3.- Rudimentos de programación. FORTRAN90. 10h</i> <i>Tema 4.- Aplicaciones científicas en GNU/Linux. 4h</i> <i>Tema 5.- Magnitudes de interés espectroscópico. 2h</i> <i>Tema 6.- Simetría Molecular y Teoría de Representaciones. 2h</i> <i>Tema 7.- Mecánica Cuántica y Teoría de Grupos. 3h</i> <i>Tema 8.- Átomos monoelectrónicos. 2h</i> <i>Tema 9.- Átomos polielectrónicos. 4h</i> <i>Tema 10.- Espectroscopía Vibrorrotacional. 4h</i> <i>Tema 11.- Efecto Raman. 3h</i> <i>Tema 12.- Espectroscopía Electrónica. 3h</i>																												
Metodología Docente Empleada:	<table><tr><td>Sesiones académicas Teóricas: X</td><td>Sesiones académicas de Problemas: X</td></tr><tr><td>Sesiones académicas Aula inf.: X</td><td>Actividades Académicas Dirigidas: X</td></tr></table> <p>Las sesiones en el aula de informática se dedicarán a impartir la materia del bloque I, concentrándose en la primera mitad del curso, para permitir a los alumnos obtener los conocimientos adecuados a la resolución de los problemas que se les planteen en los tres bloques siguientes. Dichas clases podrán sustituirse por clases donde los alumnos aporten su propio ordenador portátil, lo que les permitirá sacar más partido a estas máquinas.</p> <p>Actividades Académicas Dirigidas: Estas actividades académicas dirigidas irán orientadas a potenciar y motivar la capacidad de los alumnos para afrontar la resolución de cuestiones y problemas relacionadas con esta materia mediante la resolución de problemas prácticos.</p>				Sesiones académicas Teóricas: X	Sesiones académicas de Problemas: X	Sesiones académicas Aula inf.: X	Actividades Académicas Dirigidas: X																					
Sesiones académicas Teóricas: X	Sesiones académicas de Problemas: X																												
Sesiones académicas Aula inf.: X	Actividades Académicas Dirigidas: X																												
Técnicas Docentes:	Sesiones teóricas. Presentaciones PC. Sesiones en aula de informática. Lectura de bibliografía especializada. Tutorías personalizadas. Uso de aplicaciones de “e-learning” (Moodle).																												
Criterios de Evaluación:	La asignatura se evaluará de forma continua conforme se vaya impartiendo y de acuerdo con el rendimiento en las clases prácticas (20%), resolución de problemas (30%) y presentación de las AADD (50%). A final de curso habrá la posibilidad de una prueba escrita para aquellos alumnos que no superen la asignatura con la evaluación continua.																												

<p><b>Bibliografía Fundamental:</b></p>	<p>Estructura Atómica y Molecular:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Peter F. Bernath. <i>Spectra of Atoms and Molecules</i>. Ed. Oxford University Press. 1995.</li> </ul> <p>Computación:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Ian D. Chivers and Jane Sleightholme. <i>Introduction to Programming with Fortran</i>. Ed. Springer-Verlag London 2006.</li> <li>- José E. García Ramos, Francisco Pérez Bernal y José Rodríguez Quintero. <i>Curso de Introducción al Sistema Operativo GNU/LINUX</i>. Apuntes. 2005.</li> </ul>
<p><b>Bibliografía Complementaria:</b></p>	<p>Estructura Atómica y Molecular:</p> <p>Morton Hamermesh. <i>Group Theory and Its Applications to Physical Problems</i>. Ed. Dover. 1989.</p> <p>P.R. Bunker y P. Jensen. <i>Fundamentals of Molecular Symmetry</i>. Ed. IOP Publishing. 2005.</p> <p>D. M. Bishop. <i>Group Theory and Chemistry</i>. Ed. Dover. 1993.</p> <p>D. J. Tannor. <i>Introduction to Quantum Mechanics: A Time-Dependent Perspective</i>. Ed. University Science Books. 2007.</p> <p>G. Herzberg. <i>Atomic Spectra and Atomic Structure</i>. Ed. Dover. 1945.</p> <p>G. Herzberg. <i>Spectra of Diatomic Molecules</i>. Ed. Van Nostrand Reinhold. 1950.</p> <p>G. Herzberg. <i>Infrared and Raman Spectra of Polyatomic Molecules</i>. Ed. Van Nostrand Reinhold. 1945.</p> <p>G. Herzberg. <i>Infrared and Raman Spectra of Polyatomic Molecules</i>. Ed. Van Nostrand Reinhold. 1945.</p> <p>G. Herzberg. <i>Electronic Spectra and Electronic Structure of Polyatomic Molecules</i>. Ed. Van Nostrand Reinhold. 1966.</p> <p>H. Kroto. <i>Molecular Rotation Spectra</i>. Ed. Dover. 1992.</p> <p>Jeffrey I. Steinfeld. <i>Molecules and Radiation</i>. Ed. Dover. 2005.</p> <p>Computación:</p> <p>William H. Press et al. <i>Numerical Recipes 3<sup>rd</sup> Edition: The Art of Scientific Computing</i>. Ed. Cambridge University Press 2007.</p> <p>William H. Press et al. <i>Numerical Recipes in FORTRAN77: The Art of Scientific Computing</i>. Ed. Cambridge University Press 1992.</p> <p>Randal Schwartz et al. <i>Learning Perl</i>, 5th Edition. Ed. O'Reilly 2008.</p> <p>Rubin H. Landau. <i>A First Course in Scientific Computing: Symbolic, Graphic, and Numeric Modeling Using Maple, Java, Mathematica, and Fortran90</i>. Ed. Princeton University Press. 2005.</p> <p>José E. García Ramos, Alberto Molina Coballes y Francisco Pérez Bernal. <i>Curso de Administración de Sistemas Operativos GNU/LINUX</i>. 2006. <a href="http://www.uhu.es/gem/clinix/docs.php">http://www.uhu.es/gem/clinix/docs.php</a></p> <p>W. N. Venables and the R Development Core Team. <i>An Introduction to R. Notes on R: A Programming Environment for Data Analysis and Graphics</i>. 2008 <a href="http://www.r-project.org">http://www.r-project.org</a></p>

**DOCENCIA EN EL CURSO 2011-2012**

**Horas de trabajo del alumno (ver tabla ECTS)**

Presencial			Estudio						
Teoría	Problemas	Prácticas	Teoría	Problemas	Prácticas				
15	21	0	15	25	0	9 (3 presencial + 6 estudio) (Anexo 2)	0	0	85

(AAD = Actividades Académicas Dirigidas)

**CRONOGRAMA**

(Anexo 3)

## ANEXO 1

### **Competencias a adquirir por Bloques Temáticos**

La siguiente Tabla recoge las capacidades (columna primera) a adquirir por el estudiante en las distintas unidades temáticas (fila primera) de la asignatura. En cada una de las unidades temáticas se entienden incluidas todas las actividades derivadas de la docencia teórica, práctica y dirigida.

<b>Capacidad</b>	<b>Bloque I</b>	<b>Bloque II</b>	<b>Bloque III</b>	<b>Bloque IV</b>
Conocimiento y comprensión de conceptos básicos	X	X	X	X
Planificación del trabajo	X	X	X	X
Análisis y discusión de bibliografía		X	X	X
Análisis y discusión de datos	X	X	X	X
Resolución de problemas			X	X
Trabajo en equipo	X	X	X	X
Compromiso ético y/o ambiental	X			
Destreza técnica	X			
Otras .....				

## **Anexo 2**

### ***Relación de Actividades Académicas Dirigidas para la asignatura de Física Molecular, de 5º curso de Ldo. en Ciencias Químicas***

Se realizarán según el calendario y se centrarán en la aplicación a problemas básicos planteados en la teoría de los bloques II, III y IV de la asignatura de los conceptos prácticos y las herramientas informáticas presentadas en el bloque I. Estas AADD se realizarán de forma individual o por grupos reducidos. Los problemas que se resolverán en las AADD se asignarán durante las semanas 10ª a la 12ª y las tres últimas semanas se dedicarán a sesiones de AADD donde se oriente a los alumnos para la resolución de dichos problemas. Los programas se entregarán durante la última semana presetándose al conjunto de la clase.

### ANEXO 3

#### **Calendario orientativo (se indica la organización de la asignatura por semanas)**

##### **Unidades temáticas:**

Clave:

B1: Bloque 1, Introducción al sistema operativo GNU/Linux

B2: Bloque 2, Repaso de Teoría de Grupos y Mecánica Cuántica

B3: Bloque 3, Lenguaje de programación Fortran90

B4: Bloque 4, Espectroscopía Atómica y Molecular

AAD: Actividades Académicamente Dirigidas.

##### Dedicación presencial (incluye actividades dirigidas)

Actividad	S1	S2	S3	S4	S5	S6	S7	S8	S9	S10	S11	S12	S13	S14	S15
Clases de teoría	B2 (1 h)	B2 (1 h)	B2 (1 h)		B2 (1 h)	B3 (1 h)		B2 (2 h)	B3 (2 h)	B4 (2 h)	B4 (2 h)	B4 (2 h)			
Clases Aula Informática	B1 (2 h)	B1 (2 h)	B1 (2 h)	B1 (2 h)	B1 (2 h)	B1 (1 h)	B3 (3 h)								
Clases de problemas				B2 (1 h)		B2 (1 h)		B3 (1 h)	B3 (1 h)	B4 (1 h)	B4 (1 h)	B4 (1 h)			
Actividades dirigidas													AAD (3 h)	AAD (3 h)	AAD (3 h)

Según consta en la tabla de adaptación ECTS de primer curso:

(S1, S2, S3... : semana 1, semana 2, semana 3...)

Clases teóricas: 15 horas

Clase de problema: 7 horas

Clases aula informática: 14 horas, según horario (la fecha de comienzo de las prácticas queda pendiente de la disponibilidad del aula)

Actividades Académicas Dirigidas: 9 horas. Cada grupo de Teoría (21) se dividirá en 3 grupos (G1,G2,G3) de siete alumnos

Total: 45 horas

### Dedicación no presencial

CALENDARIO DE TRABAJO O ESTUDIO. DEDICACIÓN NO PRESENCIAL																
Semana	1ª	2ª	3ª	4ª	5ª	6ª	7ª	8ª	9ª	10ª	11ª	12ª	13ª	14ª	15ª	Horas totales
Bloques	I-II	I-II	I-II	I-II	I-II	I-II-III	III	II-III	III	IV	IV	IV				
Clases	3	3	3	3	3	3	3	5	5	6	6	6				46
AADD										4	4	4	8	8	8	36
Exámenes incluyendo preparación																0
<b>TOTAL DE HORAS DE TRABAJO O ESTUDIO</b>																<b>85</b>