

**Guía docente de la asignatura**

Asignatura	QUÍMICA FÍSICA II		
Materia	QUÍMICA FÍSICA		
Módulo			
Titulación	GRADO EN QUÍMICA		
Plan	472	Código	45953
Periodo de impartición	Segundo cuatrimestre, 2º Curso	Tipo/Carácter	OB
Nivel/Ciclo	GRADO	Curso	2º
Créditos ECTS	6		
Lengua en que se imparte	ESPAÑOL		
Profesor/es responsable/s	GRUPO 1: Juan Carlos López Alonso GRUPO 2: José Luis Alonso Hernández		
Datos de contacto (E-mail, teléfono...)	iclopez@qf.uva.es jalonso@qf.uva.es		
Horario de tutorías			
Departamento	Química Física y Química Inorgánica		



1. Situación / Sentido de la Asignatura

1.1 Contextualización

En el Plan de Estudios del Grado en Química, el alumno, tras cursar el bloque básico, comienza el bloque fundamental dedicado a materias más específicas de las diferentes áreas de la Química, entre las que se encuentra la Química Física, área a la que pertenece esta asignatura.

1.2 Relación con otras materias

La asignatura Química Física II emplea conocimientos adquiridos en la asignatura Química Física I cursada en el primer cuatrimestre del segundo curso. La asignatura, también está estrechamente relacionada con otra de segundo curso, la Química Experimental II, pues parte de ésta se dedica a llevar a la práctica, en laboratorio, los conocimientos teóricos de Química Física II.

1.3 Prerrequisitos

Para cursar la Química Física II es recomendable haber superado la asignatura Química Física I.



2. Competencias

G1, G2, G3, G4, G8, G9, EC1, EC2, EC3, EC7, EC8, EH1, EH2, EH3, EH4, EH5, EH6 (Según el punto 3.2 y 5.1 de la memoria de verificación del plan de estudios de Graduado en Química)

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.

2.2 Específicas

- EC.1- Conocer y manejar los aspectos principales de terminología química.
- EC.2- Conocer la Tabla Periódica, su utilidad y las tendencias periódicas en las propiedades de los elementos.
- EC.3- Conocer los modelos y principios fundamentales de enlace entre los átomos, los principales tipos de compuestos a que esto da lugar y las consecuencias en la estructura y propiedades de los mismos.
- EC.7- Conocer los métodos fundamentales de análisis y caracterización estructural de compuestos químicos.
- EC.8- Reconocer aquellos aspectos dentro de la química que son interdisciplinares o que suponen una frontera en el conocimiento.
- EH.1- Ser capaz de demostrar el conocimiento y comprensión de conceptos, principios y teorías esenciales en relación con la química.
- EH.2- Ser capaz de aplicar los conocimientos adquiridos a la resolución de problemas cualitativos y cuantitativos.
- EH.3- Ser capaz de reconocer y analizar un problema y plantear estrategias para su resolución.
- EH.4- Ser capaz de analizar, interpretar y evaluar información química y datos químicos.
- EH.5- Ser capaz de comunicar información química y argumentar sobre ella.
- EH.6- Manejar las herramientas computacionales y de tecnología de la información básicas para el procesamiento de datos e información química.



3. Objetivos

- Conocer los principios de la Mecánica Cuántica y su aplicación a la descripción de las propiedades de los átomos y las moléculas
- Conocer los fundamentos de la interacción radiación-materia, el origen de los fenómenos espectroscópicos, su fundamento cuántico y las diferentes técnicas de investigación estructural.
- Explicar conocimientos básicos sobre distintas técnicas espectroscópicas modernas, qué información proporcionan y en qué condiciones son aplicables.
- Comprender y predecir el comportamiento y reactividad de átomos y moléculas a partir del análisis de su estructura, que podrá determinarse a partir de datos espectroscópicos.
- Describir el funcionamiento y manejo de láseres y su aplicación en espectroscopia
- Reconocer la importancia científica de la Química Física y su impacto en la sociedad industrial y tecnológica.
- Comprender y utilizar la información bibliográfica y técnica referida a los fenómenos fisicoquímicos.

Estos resultados implican la adquisición, de forma completa o parcial de las competencias que se indican más arriba (algunas competencias se adquieren o perfeccionan a lo largo de todo el periodo formativo del grado).



4. Tabla de dedicación del estudiante a la asignatura

ACTIVIDADES PRESENCIALES	HORAS	ACTIVIDADES NO PRESENCIALES	HORAS
Clases teóricas	40	Estudio y trabajo autónomo individual	90
Clases prácticas	10	Estudio y trabajo autónomo grupal	
Laboratorios			
Prácticas externas, clínicas o de campo			
Seminarios	5		
Otras actividades	5		
Total presencial	60	Total no presencial	90





5. Bloques temáticos

Bloque 1: FUNDAMENTOS

Tema 1. Simetría Molecular.

Introducción.- Elementos y Operaciones de Simetría.- Estructura de Grupo: Grupos Puntuales.- Determinación del Grupo Puntual: Notación de grupos.- Momentos dipolares y actividad óptica. Representación matricial de Grupos.- Teorema de la Gran Ortogonalidad: Tablas de Caracteres.- Reducción de una representación.- Simetría y Química Cuántica.- Producto Directo: Integrales mecanocuánticas y Reglas de Selección.- Operador de Proyección. Aplicaciones de la Teoría de Grupos.

Tema 2. Espectroscopía: Fundamentos.

Introducción.- Radiación electromagnética y materia.- Procesos resonantes y no resonantes: Dispersión.- Tratamiento clásico y semiclásico de la interacción radiación-materia: Coeficientes de Einstein.- Emisión espontánea.- Reglas de selección.- Niveles de energía: Regiones del espectro electromagnético.- Población de niveles: Intensidades.- Ley de Bouguer-Lambert-Beer.- Forma y anchura de línea.- Técnicas experimentales.

Carga de trabajo en créditos ECTS:

Bloque 2: TÉCNICAS ESPECTROSCÓPICAS

Tema 3.- Espectros de Rotación.

Mecánica clásica de la rotación molecular: Clasificación de las moléculas.-Espectros de moléculas diatómicas y lineales.- Población de niveles e intensidad de las transiciones.- Distorsión centrífuga.- Espectros de Trompos simétricos.- Espectros de trompos asimétricos.- Determinación de la estructura molecular. Técnicas experimentales.

Tema 4. Espectros de Vibración.

Introducción.- Osciladores armónico y anarmónico: Niveles de energía.- Potenciales empíricos: Potencial de Morse.- Espectros de vibración: reglas de selección e intensidades.- Energías de disociación.- Espectros de rotación-vibración. Moléculas Poliatómicas: Modos normales.- Simetría de los modos normales.- Reglas de selección. Frecuencias de grupo.- Técnicas experimentales.

Tema 5.- Espectros Electrónicos: Moléculas diatómicas

Introducción.- Moléculas diatómicas: Estados electrónicos y Reglas de Selección.- Estructura de vibración: Principio de Frank-Condon.- Energías de disociación.

Tema 6.- Espectros Electrónicos: Moléculas poliatómicas

Estructura electrónica: Aproximación LCAO-MO.- Moléculas.- Espectro del agua, amoníaco y formaldehído: cromóforos.- Sistemas con deslocalización electrónica: Método Hückel (HMO).- Estudios del etileno, butadieno y benceno.- Fluorescencia y fosforescencia: Diagrama de Jablonski.- Espectroscopía de UV-VIS: Técnicas experimentales y aplicaciones analíticas.

Carga de trabajo en créditos ECTS:

Bloque 3: OTRAS TÉCNICAS

Tema 7.- Espectros Fotoelectrónicos.

Introducción.- Procesos de fotoelectrónicos.- Espectroscopía fotoelectrónica de UV (UPS): interpretación de los espectros; técnicas experimentales.- Espectroscopía fotoelectrónica de rayos X (XPS): interpretación de los espectros; desplazamiento químico; técnicas experimentales.

Tema 8.- Espectroscopia del Láser.

Fundamentos del láser: métodos de inversión de población.- Propiedades de la radiación láser.- Tipos de láseres.- Polarizabilidad molecular: dispersión Rayleigh y Raman.- Espectroscopía Laser Raman: espectros de vibración.- Fluorescencia Inducida por Laser.- Espectroscopías de ionización multifotónica.- Otras aplicaciones químicas y espectroscópicas.

Carga de trabajo en créditos ECTS:

a. Contextualización y justificación



La asignatura está estructurada en tres bloques. En el primero se introducen los elementos de la teoría de grupos necesarios para el estudio de la estructura de moléculas poliatómicas así como los fundamentos de los procesos de interacción radiación-materia presentes en todas las técnicas experimentales propias de la espectroscopia molecular y que se desarrollan en los siguientes bloques. En el segundo bloque se aborda el estudio de las espectroscopias clásicas de rotación, vibración y electrónicas dedicadas al estudio estructural de moléculas diatómicas y poliatómicas. El capítulo dedicado a espectros electrónicos recoge igualmente el tratamiento mecanocuántico de moléculas poliatómicas. Las técnicas relacionadas con los procesos de fotoionización y dispersión no contemplados dentro de los procesos resonantes de las espectroscopias clásicas del bloque anterior se recogen en el tercer bloque. Las espectroscopias fotoelectrónicas y Raman, junto con los fundamentos y propiedades del láser, constituyen la esencia de este bloque.

b. Objetivos de aprendizaje

Conocer los fundamentos de la interacción radiación-materia, el origen de los fenómenos espectroscópicos, su fundamento cuántico y las diferentes técnicas de investigación estructural.

c. Contenidos

Simetría Molecular. Fundamentos de Espectroscopia Molecular. Espectroscopias de rotación, vibración. Y electrónica. Espectroscopias fotoelectrónicas y Raman. Espectroscopias con laser

d. Métodos docentes

Las clases teóricas corresponden a lecciones magistrales participativas en las que el alumno interviene mediante la formulación de preguntas al profesor o contestando las que el profesor plantea a lo largo de la impartición de los contenidos.

Las clases de problemas y seminarios consisten en la resolución de ejercicios y casos prácticos previamente preparados por el alumno o planteados durante la clase. Algunos de estos seminarios pueden emplearse para profundizar en conceptos de especial dificultad, haciendo hincapié en sus aspectos más prácticos. Estas clases y el trabajo autónomo de los alumnos para prepararlas son fundamentales para desarrollar las competencias específicas referidas a destrezas y habilidades (EH).

Con el propósito de que los alumnos estudien la asignatura de una forma progresiva y de fomentar el interés por la misma, se les propone realizar cuestionarios online a través de la plataforma Moodle.

e. Plan de trabajo

Los alumnos participarán en sesiones de tutorías con los profesores responsables de las asignaturas. En ellas se trabaja sobre las dificultades concretas que plantea cada alumno. El trabajo autónomo, no presencial, de los alumnos viene a constituir un 60% de la carga de trabajo global

f. Evaluación

La evaluación de los alumnos se realizará mediante: a) Seguimiento continuo a través de controles periódicos o evaluación de problemas, trabajos u otras actividades; b) Examen final. En la calificación final tendrá mayor peso la nota obtenida en el examen final. La evaluación de la asignatura se realizará de forma similar en los



distintos grupos en que se dividan los alumnos del curso, procurando que el examen final sea el mismo para todos ellos.

g. Bibliografía básica

“QUÍMICA FÍSICA” Atkins, P. W., de Paula, J.; Editorial Medica Panamericana (2008).

“FISICOQUÍMICA” Levine, I.N., 5ª ed. McGraw Hill (2005).

“FUNDAMENTALS OF MOLECULAR SPECTROSCOPY” Banwell, C.N., McCash, E.M., McGraw-Hill Higher Education; 4ª ed. (1994).

“INTRODUCTION TO MOLECULAR SPECTROSCOPY” Barrow, G.M., McGraw-Hill (1962).

“SPECTRA OF ATOMS AND MOLECULES” Bernath, P., Oxford University Press; 2ª ed. (2005).

h. Bibliografía complementaria

“MOLECULAR PHYSICS” Demtröder, W., Wiley-VCH (2005).

“SYMMETRY AND SPECTROSCOPY” Harris, D. C. y Bertolucci, M. D., Dover Publications (1990).

“MODERN SPECTROSCOPY” Hollas, J. M., John Wiley & Sons (2004).

“MOLECULAR SPECTROSCOPY” Levine, I. N., John Wiley & Sons Inc (1975).

“MOLECULAR SPECTROSCOPY” McHale, J.L., Prentice Hall (1998).

“ESPECTROSCOPÍA” Requena, A. y Zúñiga, J., Pearson Educacion (2004).

“MOLECULES AND RADIATION” Steinfeld, J.I., Dover Publications, 2ª ed. (2005).

i. Recursos necesarios

La mayor parte de la asignatura se realizará en el aula. Se utilizará equipo informático y de proyección audiovisual. Los alumnos dispondrán en la plataforma MOODLE de la UVa de toda la información básica requerida: Guía docente, contenidos-presentaciones, ejercicios de autoevaluación, colección de problemas para su uso en clase y trabajo personal.

Para consultas de los alumnos, el horario de tutorías será fijado por cada profesor responsable.

Añada tantas páginas como bloques temáticos considere realizar.

**6. Temporalización (por bloques temáticos)**

BLOQUE TEMÁTICO	CARGA ECTS	PERIODO PREVISTO DE DESARROLLO
1. FUNDAMENTOS	2	Inicio 2º cuatrimestre-2ª semana marzo
2. TÉCNICAS ESPECTROSCÓPICAS	2.5	3ª semana marzo-final de abril
3. OTRAS TÉCNICAS	1.5	Mes de mayo

7. Sistema de calificaciones – Tabla resumen

INSTRUMENTO/PROCEDIMIENTO	PESO EN LA NOTA FINAL	OBSERVACIONES
Controles periódicos, resolución de problemas o casos prácticos, tutorías.	25%	
Examen final en las fechas y convocatorias fijadas por la Facultad de Ciencias	75%	

8. Consideraciones finales