FITXA IDENTIFICATIVA

Dades de l'Assignatura

Codi	34194
Nom	Química física II
Cicle	Grau
Crèdits ECTS	4.5
Curs acadèmic	2016 - 2017

Titulació/titulacions

Titulació	Centre	Curs	Període
1108 - Grau de Química	Facultat de Química	2	Segon quadrimestre

Matèries

Titulació	Matèria	Caràcter
1108 - Grau de Química	7 - Química Física	Obligatòria

Coordinació

Nom	Departament
NEBOT GIL, IGNACIO JOSE	315 - Química Física

RESUM

Amb l'assignatura “Química física II” es pretén, essencialment, que l'alumne adquirisca coneixements bàsics de dues parts fonamentals de la química física: la química quàntica i l'espectroscòpia. La química quàntica consisteix en l'aplicació de la física quàntica a l'estudi de l'estructura atòmica i molecular. L'espectroscòpia es pot definir com l'estudi de la interacció de la radiació electromagnètica amb la matèria i utilitza principalment coneixements de química quàntica. Ambdues matèries són cada vegada més interdisciplinàries, ja que s'usen comunament en altres branques de la química.

Per tant, amb aquesta assignatura s'estableixen les bases necessàries perquè l'estudiant puga abordar posteriorment amb èxit l'estudi de diferents parts de la química i de la química física mateix, que fan servir habitualment els conceptes de la química quàntica i de l’espectroscòpia.

CONEIXEMENTS PREVIS

Relació amb altres assignatures de la mateixa titulació

No heu especificat les restriccions de matrícula amb altres assignatures del pla d'estudis.

Altres tipus de requisits

Aquesta assignatura no té restriccions de matrícula amb cap altra de la titulació. En tot cas, per poder abordar amb èxit l'assignatura, són imprescindibles coneixements bàsics previs, del nivell que sexigeix en el primer curs del grau en Química, en:

Mecànica i electromagnetisme (Física I i II)

Estructura atòmica i molecular (Química I)

Matemàtiques: logaritmes, exponencials, nombres complexos, derivades i integrals senzilles, equacions diferencials ordinàries i fonaments d'estadística i combinat

COMPETÈNCIES

1108 - Grau de Química

- Desenvolupar capacitat d'anàlisi, síntesi i raonament crític.
- Demostrar capacitat inductiva i deductiva.
- Demostrar capacitat de gestió i direcció, esperit emprenedor, iniciativa, creativitat, organització, planificació, control, lideratge, presa de decisions i negociació.
- Resoldre problemes de forma efectiva.
- Demostrar capacitat de treball en equip incloent equips de caràcter interdisciplinari i en un context internacional.
- Demostrar habilitat per a transmetre informació, idees, problemes i solucions tant a un public especialitzat com no especialitzat i utilitzant si escau les tecnologies de la informació.
- Comprometre's amb l'ètica, els valors d'igualtat i la responsabilitat social com a ciutadà i com professional.
- Aprendre de forma autònoma.
- Demostrar capacitat per a adaptar-se a situacions noves.
- Adquirir una sensibilitat permanent per la qualitat i el medi ambient, el desenvolupament sostenible i la prevenció de riscos laborals.
- Demostrar que coneix els aspectes principals de terminologia química, nomenclatura, convenis i unitats.
- Interpretar la variació de les propietats característiques dels elements químics segons la taula periòdica.

- Demostrar que coneix les característiques i el comportament dels diferents estats de la matèria i les teories usades per descriure'ls.
- Demostrar que coneix els tipus principals de reacció química i les seues característiques principals associades.
- Demostrar que coneix els principis de la mecànica quàntica i l'aplicació a la descripció de l'estructura i de les propietats d'àtoms i molècules.
- Resoldre problemes qualitatius i quantitatius segons models desenvolupats prèviament.
- Reconèixer i analitzar problemes nous i planejar estratègies per solucionar-los.
- Relacionar teoria i experimentació.
- Reconèixer i valorar els processos químics en la vida diària.
- Comprendre els aspectes qualitatius i quantitatius dels problemes químics.
- Desenvolupar metodologies sostenibles i respectuoses amb el medi ambient.
- Que els estudiants sàpien aplicar els seus coneixements al seu treball o vocació d'una forma professional i posseïsquen les competències que solen demostrar-se per mitjà de l'elaboració i defensa d'arguments i la resolució de problemes dins de la seua àrea d'estudi.
- Que els estudiants tinguen la capacitat d'arreplegar i interpretar dades rellevants (normalment dins de la seua àrea d'estudi) per emetre judicis que incloguen una reflexió sobre temes rellevants d'índole social, científica o ètica.
- Que els estudiants puguen transmetre informació, idees, problemes i solucions a un públic tant especialitzat com no especialitzat.
- Que els estudiants hagen desenvolupat aquelles habilitats d'aprenentatge necessàries per a emprendre estudis posteriors amb un alt grau d'autonomia.
- Expressar-se correctament, tant en forma oral com escrita, en qualsevol de les llengües oficials de la Comunitat Valenciana.
- Posseir habilitats bàsiques en tecnologies de la informació i comunicació i gestionar adequadament la informació obtinguda.

RESULTATS DE L'APRENENTATGE

En aquesta assignatura s'aborden els resultats d'aprenentatge següent, que estan continguts en el document de grau, dins la matèria de química física:

1. Demostrar capacitat de comprendre i predir el comportament i la reactivitat d'àtoms i molècules a partir de l'anàlisi de la seua estructura, que es pot determinar a partir de dades espectroscòpiques (CE2, CE3, CE4, CE5).
2. Comprendre i utilitzar eficaçment la informació bibliogràfica i tècnica referida als fenòmens fisicoquímics (CG7, CE23, CE24, CT3).
3. Realitzar eficaçment les tasques assignades com a membre d'un equip i amb perspectiva de gènere

(CG5, CG6).
4. Resoldre problemes amb rigor (CG4, CG10, CE1, CE14, CE15, CE22, CE23).
5. Demostrar adaptació a noves situacions (CG3, CG9).
6. Demostrar capacitat d'anàlisi i síntesi (CG1).
7. Demostrar capacitat inductiva i deductiva (CG2).
8. Demostrar capacitat d'organització i planificació (CG3).
9. Escriure i exposar amb correcció en les llengües natives i saber expressar-se i comprendre una llengua estrangera comunitària (CT1, CG6).
10. Gestionar la informació amb rigor (CG7, CT3).
11. Demostrar compromís ètic i amb perspectiva de gènere (CG6, CE25).
12. Aprendre de manera autònoma (CG8).

Aquests resultats d'aprenentatge han de permetre que, en acabar l'assignatura, l'estudiant ha de ser capaç de:

- Definir els termes: operador, commutador, equació de valors propis, valor propi i funció pròpia.
- Establir la relació entre operadors i observables.
- Descriure el significat de la funció d'ona i extreure la informació d'aquesta funció mitjançant l'aplicació dels diferents postulats de la química quàntica.
- Definir el valor mitjà o esperat d'un observable.
- Formular el principi d'indeterminació i la seua relació amb la mesura simultània de diverses propietats.
- Plantejar i resoldre l'equació de Schrödinger per a una partícula confinada en un recinte unidimensional.
- Plantejar l'equació de Schrödinger per a una partícula confinada en un recinte bi o tridimensional utilitzant la tècnica de separació de variables.
- Definir el concepte de degeneració i la diferència entre estat i nivell d'energia.
- Plantejar l'equació de Schrödinger per a un oscil·lador harmònic i analitzar-ne les solucions.
- Formular el problema del moment angular orbital i analitzar els valors possibles per a la mesura simultània del mòdul del moment angular i la seua projecció sobre un eix. Aplicar-ho al moviment de rotació d'un rotor diatòmic
- Plantejar la resolució de l'equació de Schrödinger per a l'àtom d'hidrogen, i demostrar que es pot separar en equacions radial i angular.
- Definir les energies i funcions d'ona dels orbitals hidrogenoides i utilitzar les seues diferents representacions.
- Definir el concepte general d'espín i les propietats d'espín d'un electró.
- Plantejar l'operador hamiltonià d'un àtom polielectrònic.
- Utilitzar mètodes aproximats per resoldre l'equació de Schrödinger de sistemes polielectrònics: Mètode variacional.
- Plantejar l'equació de Schrödinger per a l'àtom d'heli i la seua resolució a diferents nivells d'aproximació. Descriure el model orbital.
- Establir el principi d'antisimetria per a sistemes de partícules idèntiques i aplicar-lo als àtoms d'heli i liti. Plantejar el determinant de Slater
- Enunciar el mètode del camp autoconsistent (SCF-HF) per a àtoms polielectrònics.
- Diferenciar entre orbital atòmic i funció d'estat de l'àtom, energia orbital i energia total de l'àtom. Discutir les configuracions electròniques.

- Formular l'operador hamiltonià per a una molècula poliatòmica.
- Descriure l'aproximació de Born-Oppenheimer i el concepte de superfície d'energia potencial.
- Analitzar les solucions exactes de la molècula ió d'hidrogen i les que s'obtenen amb el mètode aproximat OM-CLOA.
- Descriure l'aplicació del mètode OM-CLOA en la molècula d'hidrogen.
- Discutir l'estructura electrònica de molècules diatòmiques utilitzant els models d'OM qualitatiu i SCF-HF.
- Aplicar el mètode de Hückel a sistemes conjugats i aromàtics.
- Descriure correctament el fenomen espectroscòpic i els tipus d'espectroscòpia.
- Descriure l'aproximació semiclàssica de la interacció radiació-matèria.
- Definir el moment dipolar de transició i diferenciar entre regles de selecció genèriques i específiques.
- Descriure els diferents factors de què depèn la intensitat i l'amplada d'un senyal espectroscòpic.
- Formular la llei de distribució de Boltzmann i relacionar la intensitat d'un senyal espectroscòpic amb la població dels nivells d'energia i la probabilitat de la transició.
- Definir la mesura experimental de la intensitat d'un senyal espectroscòpic.
- Formular la separació dels diferents tipus de moviment nuclear.
- Plantejar els nivells d'energia rotacional dels rotors diatòmics i lineals, i interpretar la forma de l'espectre rotacional pur utilitzant les regles de selecció.
- Plantejar els nivells d'energia vibracional per a una molècula diatòmica utilitzant les aproximacions harmònica i anharmònica.
- Esquematitzar les transicions que componen un espectre de vibració pura i interpretar l'efecte de la anharmonicitat en aquestes transicions.
- Explicar les característiques dels espectres de rotació-vibració de molècules diatòmiques i extreure informació estructural de les branques P, Q i R.
- Enunciar les propietats del moviment vibracional d'una molècula poliatòmica i el concepte de modes normals de vibració.
- Analitzar de manera simple l'espectre vibracional d'una molècula poliatòmica.
- Descriure les característiques de l'espectroscòpia Raman rotacional i vibracional.
- Analitzar l'espectre electrònic d'una molècula diatòmica i explicar la seua estructura vibracional utilitzant el principi de Franck-Condon.
- Definir el concepte de grup cromòfor i diferenciar els tipus de transicions que tenen lloc en l'espectre electrònic de molècules poliatòmiques.
- Descriure els fenòmens de fluorescència i fosforescència, i les seues propietats.

DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

1. Conceptes bàsics. Principis de la mecànica quàntica.

Desenvolupament de la teoria quàntica. Dualitat ona-corpuscle. Equació de Schrödinger. Formalisme matemàtic. Postulats de la mecànica quàntica. Estats estacionaris. Principi d'incertesa

2. Sistemes model.

Moviment de translació: partícula en un recinte unidimensional. Partícula en un recinte bidimensional. Tècnica de separació de variables. Barreres finites i efecte túnel. Moviment vibracional: oscil·lador harmònic.

3. Àtom dhidrogen

Introducció. Moment angular orbital. Rotor rígid. Àtom d'hidrogen: plantejament de la solució formal de l'equació de Schrödinger. Energies i funcions dels estats lligats. Moment angular despín.

4. Àtoms poliectrònics.

Àtoms polielectrònics: plantejament general. Mètodes aproximats. Àtom d'heli. Aproximació orbital. Principi dantisimetria. Orbitals autoconsistents (SCF). Estats electrònics.

5. Estructura molecular

Molècules polielectròniques: plantejament general. Aproximació de Born-Oppenheimer. La molècula ió d'hidrogen (mètode OM-CLOA). La molècula d'hidrogen. Molècules diatòmiques. Molècules poliatòmiques. Sistemes -electrònics. Mètode de Hückel.

6. Fonaments despectroscòpia

La radiació electromagnètica. Espectroscòpia: tipus d'espectres. Interacció radiació matèria: aproximació semiclàssica. Llei de distribució de Boltzmann. El senyal espectroscòpica: posició, intensitat i amplària. Intensitat d'un senyal espectroscòpic. Llei de Lambert-Beer.

7. Espectroscòpies de rotació i vibración.

Espectroscòpies de moviment nuclear col·lectiu. Nivells d'energia rotacional de molècules diatòmiques i lineals. Espectres de rotació pura. Espectroscòpia de microones. Nivells d'energia vibracional. Espectres de vibració de molècules diatòmiques. Espectres de rotació-vibració. Espectres de vibració de molècules poliatòmiques: modes normals de vibració. Espectroscòpia IR. Espectroscòpia Raman.

8. Espectroscòpia electrònica

Interpretació quàntica dels espectres electrònics: molècules diatòmiques. Estructura vibracional: principi de Franck-Condon. Regles de selecció. Espectroscòpia electrònica de molècules poliatòmiques. Fluorescència i fosforescència.

VOLUM DE TREBALL

ACTIVITAT	Hores	% Presencial
Classes de teoria	38,00	100
Tutories reglades	7,00	100
Estudi i treball autònom	20,00	0
Preparació d'activitats d'avaluació	25,00	0
Preparació de classes de teoria	11,50	0
Preparació de classes pràctiques i de problemes	11,00	0
TOTAL	**112,50**	

METODOLOGIA DOCENT

El desenvolupament de l'assignatura s'estructura al voltant dels eixos següents:

- classes teòriques
- tutories grupals

Pel que fa a les primeres, s'hi ofereix una visió global del tema tractat i s'incideix en aquells conceptes clau necessaris per a la seua comprensió. Així mateix, s'indicaran els recursos més recomanables per a la preparació posterior del tema en profunditat.

Les tutories es dediquen a plantejar i resoldre problemes i qüestions, que permeten identificar els elements i conceptes essencials de cada tema. Per a aquestes sessions, es proporciona una llista de qüestions i problemes que serveix per reforçar els coneixements i exercitar-se en cadascun dels aspectes tractats. L'alumne ha de lliurar resolts els problemes i qüestions que el professor indique.

AVALUACIÓ

Es fa servir els sistemes d'avaluació següent:

- Proves consistents en exàmens escrits, orals i/o pràctics.
- Avaluació de les sessions de tutories grupals, seminaris, elaboració de treballs i/o exposicions orals.
- Avaluació contínua de cada alumne basada en les activitats presencials, participació i grau d'implicació en el procés d'ensenyament-aprenentatge.

L'avaluació de l'aprenentatge dels estudiants té en compte tots els aspectes que s'han exposat en l'apartat de metodologia d'aquesta guia docent. Els estudiants que no assisteixen regularment a classe han d'optar per la modalitat B.

Modalitat A:

PRIMERA CONVOCATÒRIA

La qualificació final consta de:

- Examen escrit (80%). Consisteix en una sèrie de qüestions teòriques i problemes numèrics, que tracten sobre els conceptes bàsics impartits a classe. L'examen és el mateix per a tots els grups.
- Avaluació contínua (20%). Consisteix en l'avaluació mitjançant proves realitzades al llarg del curs en forma de tests de resposta múltiple o breu, l'avaluació de les sessions de tutories grupals, mitjançant la realització i/o lliurament d'exercicis i qüestions, i l'avaluació contínua de cada alumne basada en les activitats presencials, la participació i el grau d'implicació en el procés d'ensenyament-aprenentatge.

La qualificació mínima de l'examen escrit ha de ser igual o superior a 4,0 sobre 10 per poder fer mitjana amb la de l'avaluació contínua. La qualificació global mínima per aprovar l'assignatura és 5,0 sobre 10.

SEGONA CONVOCATÒRIA

En la segona convocatòria, els estudiants realitzen un examen escrit que consisteix en una sèrie de qüestions teòriques i problemes numèrics, que tracten sobre els conceptes bàsics impartits a classe. L'examen és el mateix per a tots els grups. La qualificació final inclou l'avaluació de la resta de les activitats de l'estudiant d'aquest curs acadèmic amb la mateixa ponderació que en la primera convocatòria. La qualificació global mínima per aprovar l'assignatura és 5,0 sobre 10.

Modalitat B

PRIMERA I SEGONA CONVOCATÒRIA

L'estudiant es pot acollir a una avaluació única mitjançant un examen escrit que, tant en primera com en segona convocatòria, consisteix en una sèrie de qüestions teòriques i problemes numèrics, que tracten sobre els conceptes bàsics impartits a classe. L'examen és el mateix per a tots els grups. La qualificació global mínima per aprovar l'assignatura és 5,0 sobre 10.

REFERÈNCIES

Bàsiques

- Atkins, P y De Paula, J. Química Física. 8º edición. Editorial Médica Panamericana, 2008. ISBN 9789500612487
- Levine, I. N. Fisicoquímica. 5ªed. MacGraw-Hill, 2004. ISBN 9788448137861 (v. 1) ISBN 9788448137878 (v. 2)
- Atkins, P. y De Paula, J. Physical Chemistry, 9ª ed., Oxford University Press, 2010. ISBN 9780199543373
- Levine, I. N., Physical Chemistry, 6ª ed., McGraw-Hill, 2008. ISBN 9780072538625 (V.1) 9780071276368 (V.2)

Complementàries

- Hanna, W., Mecánica Cuántica para Químicos, Fondo Educativo Interamericano, 1985. ISBN 9688580104
- Planelles, J., Clemente, I. y Gabriel, J., Noves Notes de Química Cuàntica, Publicacions de la Universitat Jaume I, 2ªed, 2010. www.uji.es/bin/publ/edicions/quimicaq.pdf
- McQuarrie, D.A., Quantum Chemistry, 2ª ed, University Science Books; 2007. ISBN 9781891389504
- Brown, J. M., Molecular Spectroscopy, Oxford University Press, 1998. ISBN 9780198557852
- Banwell,C. N. y McCash, E. M., Fundamentals of Molecular Spectroscopy, 4ª ed., McGraw-Hill, 1994. ISBN 9780077079765
- Planelles, J., Clemente, I. y Gabriel, J., Espectroscòpia, Publicacions de la Universitat Jaume I, 2002. ISBN 9788480213936
- Bertrán Rusca, J. y Nuñez Delgado, J.(eds.), Química Física, Vols. I y II, Ed. Ariel, 2002. 9788434480483(v.1) 9788434480490(v.2)
- Díaz Peña, M. y Roig Muntaner, A., Química Física, Vol. 1, Alhambra, 1972. ISBN 8420502561 (v.1) 8420505757 (v.2)
- Cruz-Garritz, D., Chamizo, J. A. y Garritz, A., Estructura atómica: un enfoque químico, Addison-Wesley Iberoamericana, 1987. ISBN 020164018X
- Levine, I. N., Química Cuántica, 5ª ed., Prentice Hall, 2001. ISBN 8420530964
- Requena, A. y Zúñiga, J., Espectroscopia, Pearson Prentice Hall, 2003. ISBN 8420536776
- Hollas, J. M., Modern Spectroscopy, 2ª ed., John Wiley & Sons, 1992. ISBN 0471930776
- Barrow, G. M., Introduction to Molecular Spectroscopy, McGraw-Hill, 1962. ISBN 9780070038707
- Levine, I. N., Espectroscopía Molecular, AC, 1980. ISBN 8472880389