

**FICHA IDENTIFICATIVA****Datos de la Asignatura**

Código	34194
Nombre	Química Física II
Ciclo	Grado
Créditos ECTS	4.5
Curso académico	2017 - 2018

Titulación(es)

Titulación	Centro	Curso	Periodo
1108 - Grado de Química	Facultad de Química	2	Segundo cuatrimestre

Materias

Titulación	Materia	Caracter
1108 - Grado de Química	7 - Química Física	Obligatoria

Coordinación

Nombre	Departamento
ORTI GUILLEN, ENRIQUE	315 - Química Física

RESUMEN

Con la asignatura de Química Física II se pretende, esencialmente, que el alumno adquiriera conocimientos básicos de dos partes fundamentales de la Química-Física, como son la Química Cuántica y la Espectroscopia. La Química Cuántica consiste en la aplicación de la Física Cuántica al estudio de la estructura atómica y molecular. La Espectroscopia se puede definir como el estudio de la interacción de la radiación electromagnética con la materia y utiliza principalmente conocimientos de Química Cuántica. Ambas materias son cada vez más interdisciplinarias, ya que se usan comúnmente en otras ramas de la Química.

Por lo tanto, con esta asignatura se establecerán las bases necesarias para que el estudiante pueda abordar posteriormente con éxito el estudio de diferentes partes de la Química y de la propia Química Física, que utilizan habitualmente los conceptos de Química Cuántica y Espectroscopia.



CONOCIMIENTOS PREVIOS

Relación con otras asignaturas de la misma titulación

No se han especificado restricciones de matrícula con otras asignaturas del plan de estudios.

Otros tipos de requisitos

Esta asignatura no tiene restricciones de matrícula con ninguna otra de la titulación. En todo caso, a fin de poder abordar con éxito la asignatura, son imprescindibles conocimientos básicos previos, del nivel exigido en el primer curso del Grado en Química, en:

Mecánica y Electromagnetismo (Física I y II)

Estructura atómica i molecular (Química I)

Matemáticas: logaritmos, exponenciales, números complejos, derivadas e integrales sencillas, ecuaciones diferenciales ordinarias y fundamentos de estad

COMPETENCIAS

1108 - Grado de Química

- Desarrollar capacidad de análisis, síntesis y razonamiento crítico.
- Demostrar capacidad inductiva y deductiva.
- Demostrar capacidad de gestión y dirección, espíritu emprendedor, iniciativa, creatividad, organización, planificación, control, liderazgo, toma de decisiones y negociación.
- Resolver problemas de forma efectiva.
- Demostrar capacidad de trabajo en equipo incluyendo equipos de carácter interdisciplinar y en un contexto internacional.
- Demostrar habilidad para transmitir información, ideas, problemas y soluciones tanto a un público especializado como no especializado y utilizando si procede las tecnologías de la información.
- Comprometerse con la ética, los valores de igualdad y la responsabilidad social como ciudadano y como profesional.
- Aprender de forma autónoma.
- Demostrar capacidad para adaptarse a nuevas situaciones.
- Adquirir una sensibilidad permanente por la calidad y el medio ambiente, el desarrollo sostenible y la prevención de riesgos laborales.
- Demostrar que conoce los aspectos principales de terminología química, nomenclatura, convenios y unidades.
- Interpretar la variación de las propiedades características de los elementos químicos según la Tabla Periódica.



- Demostrar que conoce las características y comportamiento de los diferentes estados de la materia y las teorías empleadas para describirlos.
- Demostrar que conoce los tipos principales de reacción química y sus principales características asociadas.
- Demostrar que conoce los principios de la Mecánica Cuántica y su aplicación a la descripción de la estructura y propiedades de átomos y moléculas.
- Resolver problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados.
- Reconocer y analizar nuevos problemas y planear estrategias para solucionarlos.
- Relacionar teoría y experimentación.
- Reconocer y valorar los procesos químicos en la vida diaria.
- Comprender los aspectos cualitativos y cuantitativos de los problemas químicos.
- Desarrollar metodologías sostenibles y respetuosas con el medio ambiente.
- 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.
- 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.
- Que los estudiantes puedan transmitir información, ideas, problemas y soluciones a un público tanto especializado como no especializado.
- Que los estudiantes hayan desarrollado aquellas habilidades de aprendizaje necesarias para emprender estudios posteriores con un alto grado de autonomía.
- Expresarse correctamente, tanto en forma oral como escrita, en cualquiera de las lenguas oficiales de la Comunidad Valenciana.
- Poseer habilidades básicas en tecnologías de la información y comunicación y gestionar adecuadamente la información obtenida.

RESULTADOS DE APRENDIZAJE

En esta asignatura se abordarán los siguientes resultados de aprendizaje contenidos en el documento de Grado, dentro de la materia de Química Física

1 Demostrar capacidad para 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 (CE2, CE3, CE4, CE5)

2 Comprender y utilizar eficazmente la información bibliográfica y técnica referida a los fenómenos físico-químicos (CG7, CE23, CE24, CT3)



3 Realizar eficazmente las tareas asignadas como miembro de un equipo y con perspectiva de género (CG5, CG6)

4 Resolver problemas con rigor (CG4, CG10, CE1, CE14, CE15, CE22, CE23)

5 Demostrar adaptación a nuevas situaciones (CG3, CG9)

6 Demostrar capacidad de análisis y síntesis (CG1)

7 Demostrar capacidad inductiva y deductiva (CG2)

8 Demostrar capacidad de organización y planificación (CG3)

9 Escribir y exponer en las lenguas nativas con corrección y saber expresarse y comprender una lengua extranjera comunitaria (CT1, CG6)

10 Gestionar la información con rigor (CG7, CT3)

11 Demostrar compromiso ético y con perspectiva de género (CG6, CE25)

12 Aprender de forma autónoma (CG8)

Estos resultados de aprendizaje han de permitir que al finalizar la asignatura el/la estudiante ha de ser capaz de:

- Definir los términos: operador, conmutador, ecuación de valores propios, valor propio y función propia
- Establecer la relación entre operadores y observables
- Describir el significado de la función de onda y extraer la información de esta función mediante la aplicación de los diferentes postulados de la Química Cuántica
- Definir el valor promedio o esperado de un observable
- Formular el principio de indeterminación y su relación con la medida simultánea de varias propiedades
- Plantear y resolver la ecuación de Schrödinger para una partícula confinada en un recinto unidimensional
- Plantear la ecuación de Schrödinger para una partícula confinada en un recinto bi- o tridimensional utilizando la técnica de separación de variables
- Definir el concepto de degeneración y la diferencia entre estado y nivel de energía
- Plantear la ecuación de Schrödinger para un oscilador armónico y analizar sus soluciones
- Formular el problema del momento angular orbital y analizar los valores posibles para la medida simultánea del módulo del momento angular y su proyección sobre un eje. Aplicarlo al movimiento de rotación de un rotor diatómico
- Plantear la resolución de la ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno, demostrando que puede separarse en ecuaciones radial y angular
- Definir las energías y funciones de onda de los orbitales hidrogenoides y utilizar sus diferentes representaciones
- Definir el concepto general de espín y las propiedades de espín de un electrón
- Plantear el Hamiltoniano de un átomo polieletrónico
- Utilizar métodos aproximados para resolver la ecuación de Schrödinger de sistemas polieletrónicos: Método variacional
- Plantear la ecuación de Schrödinger para el átomo de Helio y su resolución a distintos niveles de aproximación. Describir el modelo orbital
- Establecer el principio de antisimetría para sistemas de partículas idénticas y aplicarlo a los átomos de Helio y Litio. Plantear el determinante de Slater
- Enunciar el método del campo autoconsistente (SCF-HF) para átomos polieletrónicos
- Diferenciar entre orbital atómico y función de estado del átomo, energía orbital y energía total del átomo. Discutir las configuraciones electrónicas
- Formular el operador Hamiltoniano para una molécula poliatómica
- Describir la aproximación de Born-Oppenheimer y el concepto de superficie de energía potencial
- Analizar las soluciones exactas de la molécula ión de hidrógeno y las obtenidas con el método aproximado OM-CLOA
- Describir la aplicación del método OM-CLOA en la molécula de hidrógeno
- Discutir la estructura electrónica de moléculas diatómicas utilizando los modelos de OM cualitativo y SCF-HF
- Aplicar el método de Hückel a sistemas conjugados y aromáticos



- Describir correctamente el fenómeno espectroscópico y los tipos de espectroscopia
- Describir la aproximación semiclásica de la interacción radiación-materia
- Definir el momento dipolar de transición y diferenciar entre reglas de selección genéricas y específicas
- Describir los diferentes factores de los que depende la intensidad y la anchura de una señal espectroscópica
- Formular la ley de distribución de Boltzmann y relacionar la intensidad de una señal espectroscópica con la población de los niveles de energía y la probabilidad de la transición
- Definir la medida experimental de la intensidad de una señal espectroscópica
- Formular la separación de los diferentes tipos de movimiento nuclear
- Plantear los niveles de energía rotacional de los rotores diatómicos y lineales, e interpretar la forma del espectro rotacional puro utilizando las reglas de selección
- Plantear los niveles de energía vibracional para una molécula diatómica utilizando las aproximaciones armónica y anarmónica
- Esquematizar las transiciones que componen un espectro de vibración pura e interpretar el efecto de la anarmonicidad en dichas transiciones
- Explicar las características de los espectros de rotación-vibración de moléculas diatómicas y extraer información estructural de las ramas P, Q y R
- Enunciar las propiedades del movimiento vibracional de una molécula poliatómica y el concepto de modos normales de vibración
- Analizar de forma simple el espectro vibracional de una molécula poliatómica
- Describir las características de la espectroscopia Raman rotacional y vibracional
- Analizar el espectro electrónico de una molécula diatómica y explicar su estructura vibracional utilizando el principio de Franck-Condon
- Definir el concepto de grupo cromóforo y diferenciar los tipos de transiciones que tienen lugar en el espectro electrónico de moléculas poliatómicas
- Describir los fenómenos de fluorescencia y fosforescencia y sus propiedades

DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS

1. Conceptos básicos. Principios de la Mecánica Cuántica.

Desarrollo de la teoría cuántica. Dualidad onda-corpúsculo. Ecuación de Schrödinger. Formalismo matemático. Postulados de la Mecánica Cuántica. Estados estacionarios. Principio de incertidumbre

2. Sistemas modelo.

Movimiento de traslación: partícula en un recinto unidimensional. Partícula en un recinto bidimensional. Técnica de separación de variables. Barreras finitas y efecto túnel. Movimiento vibracional: Oscilador armónico.

3. Átomo de hidrógeno

Introducción. Momento angular orbital. Rotor rígido. Átomo de Hidrógeno: planteamiento de la solución formal de la ecuación de Schrödinger. Energías y funciones de los estados ligados. Momento angular de espín



4. Átomos polielectrónicos.

Átomos polielectrónicos: planteamiento general. Métodos aproximados. Átomo de Helio. Aproximación orbital. Principio de antisimetría. Orbitales autoconsistentes (SCF). Estados electrónicos.

5. Estructura molecular

Moléculas polielectrónicas: planteamiento general. Aproximación de Born-Oppenheimer. La molécula ión de hidrógeno (método OM-CLOA). La molécula de hidrógeno. Moléculas diatómicas. Moléculas poliatómicas. Sistemas -electrónicos. Método de Hückel.

6. Fundamentos de Espectroscopia.

La radiación electromagnética. Espectroscopia: tipos de espectros. Interacción radiación materia: aproximación semiclásica. Ley de distribución de Boltzmann. La señal espectroscópica: posición, intensidad y anchura. Intensidad de una señal espectroscópica. Ley de Lambert-Beer.

7. Espectroscopias de rotación y vibración.

Espectroscopias de movimiento nuclear colectivo. Niveles de energía rotacional de moléculas diatómicas y lineales. Espectros de rotación pura. Espectroscopia de microondas. Niveles de energía vibracional. Espectros de vibración de moléculas diatómicas. Espectros de rotación-vibración. Espectros de vibración de moléculas poliatómicas: modos normales de vibración. Espectroscopia IR. Espectroscopia Raman.

8. Espectroscopia Electrónica

Interpretación cuántica de los espectros electrónicos: moléculas diatómicas. Estructura vibracional: principio de Franck-Condon. Reglas de selección. Espectroscopia electrónica de moléculas poliatómicas. Fluorescencia y fosforescencia.



VOLUMEN DE TRABAJO

ACTIVIDAD	Horas	% Presencial
Clases de teoría	38,00	100
Tutorías regladas	7,00	100
Estudio y trabajo autónomo	20,00	0
Preparación de actividades de evaluación	25,00	0
Preparación de clases de teoría	11,50	0
Preparación de clases prácticas y de problemas	11,00	0
TOTAL	112,50	

METODOLOGÍA DOCENTE

El desarrollo de la asignatura se estructura en torno a los siguientes ejes:

- las clases teóricas
- las tutorías grupales

Por lo que respecta a las primeras, en ellas se ofrecerá una visión global del tema tratado y se incidirá en aquellos conceptos clave necesarios para su comprensión. Asimismo, se indicarán los recursos más recomendables para la preparación posterior del tema en profundidad.

Las tutorías se dedicarán al planteamiento y resolución de problemas y cuestiones, las cuales permitirán identificar los elementos y conceptos esenciales de cada tema. Para estas sesiones, se proporcionará una lista de cuestiones y problemas que servirá para reforzar los conocimientos y ejercitarse en cada uno de los aspectos tratados. El alumno/a deberá entregar resueltos los problemas y cuestiones que el Profesor indique.

- Conferencias programadas donde se abordarán temas de actualidad. Al final de la conferencia los alumnos contestarán un test con preguntas relacionadas con el contenido de la conferencia.

EVALUACIÓN

Se utilizarán los siguientes sistemas de evaluación:

- Pruebas consistentes en Exámenes Escritos, Orales y/o Prácticos
- Evaluación de las sesiones de tutorías grupales, seminarios, elaboración de trabajos y/o exposiciones orales
- Evaluación continua de cada alumno basada en las actividades presenciales, participación y grado de implicación en el proceso de enseñanza-aprendizaje



La evaluación del aprendizaje de los estudiantes tendrá en cuenta todos los aspectos expuestos en el apartado de metodología de esta guía docente. Los estudiantes que no asistan regularmente a clase deberán optar por la modalidad B.

Modalidad A:

PRIMERA CONVOCATORIA

La calificación final constará de:

- El examen escrito (80%) que consistirá en una serie de cuestiones teóricas y problemas numéricos, los cuales tratan sobre los conceptos básicos impartidos en clase. El examen será el mismo para todos los grupos.
- Evaluación continua (20%) que contempla pruebas de evaluación realizadas a lo largo del curso en forma de tests de respuesta múltiple o breve, la evaluación de las sesiones de tutorías grupales, mediante la realización y/o entrega de ejercicios y cuestiones y la evaluación continua de cada alumno basada en las actividades presenciales, participación y grado de implicación en el proceso de enseñanza-aprendizaje. La asistencia a las conferencias interdisciplinarias se evaluará mediante un test cuya nota se añadirá en un 5% a la calificación de la nota de la evaluación continua.

La calificación mínima del examen escrito deberá ser igual o superior a 4,0 sobre 10 para poder promediar con la nota de la evaluación continua. La calificación global mínima para aprobar la asignatura es 5,0 sobre 10.

SEGUNDA CONVOCATORIA

En la segunda convocatoria los estudiantes realizarán un examen escrito consistente en una serie de cuestiones teóricas y problemas numéricos, los cuales tratan sobre los conceptos básicos impartidos en clase. El examen será el mismo para todos los grupos. La calificación final incluirá la evaluación del resto de las actividades del estudiante de ese curso académico con la misma ponderación que en la primera convocatoria. La calificación global mínima para aprobar la asignatura es 5,0 sobre 10.

Modalidad B

PRIMERA Y SEGUNDA CONVOCATORIA

El estudiante podrá acogerse a ser evaluado únicamente con un examen escrito que, tanto en primera como en segunda convocatoria, consistirá en una serie de cuestiones teóricas y problemas numéricos, los cuales tratan sobre los conceptos básicos impartidos en clase. El examen será el mismo para todos los grupos. La calificación global mínima para aprobar la asignatura es 5,0 sobre 10.



REFERENCIAS

Básicas

- 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)

Complementarias

- 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