FICHA IDENTIFICATIVA

Datos de la Asignatura

Código	36451
Nombre	Química Física II
Ciclo	Grado
Créditos ECTS	6.0
Curso académico	2019 - 2020

Titulación(es)

Titulación	Centro	Curso	Periodo
1110 - Grado de Química V2-2018	Facultad de Química	3	Primer cuatrimestre

Materias

Titulación	Materia	Caracter
1110 - Grado de Química V2-2018	7 - Química Física	Obligatoria

Coordinación

Nombre	Departamento
VIRUELA MARTIN, PEDRO MANUEL	315 - Química Física

RESUMEN

Con la asignatura de ***Química Física II*** se pretende, esencialmente, que el alumno adquiera 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 interdisciplinares, 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 esta

COMPETENCIAS

1110 - Grado de Química V2-2018

- 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 publico 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.
- 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 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.
- 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.
- Poseer habilidades básicas en tecnologías de la información y comunicación y gestionar adecuadamente la información obtenida.

RESULTADOS DE APRENDIZAJE

El apartado anterior recoge las competencias contenidas en el documento VERIFICA.En esta asignatura se abordan parte de los resultados de aprendizaje de la materia Química Física que permiten adquirir, tanto conocimientos específicos de Química, como habilidades y competencias cognitivas y competencias generales recomendadas por la EUROPEAN CHEMISTRY THEMATIC NETWORK (ECTN) for the Chemistry Eurobachelor® Label. En la siguiente tabla se relacionan los resultados de aprendizaje adquiridos en la asignatura de Química Física II relacionados con las competencias del grado en Química.

CONOCIMIENTOS ESPECÍFICOS DE QUÍMICA	
El proceso de aprendizaje debe permitir a los titulados de grado demostrar:	
Principales aspectos de la terminología química, nomenclatura, convenios y unidades.	*C **1**:* **CE1:** Demostrar que conoce los aspectos principales de terminología química, nomenclatura, convenios y unidades.
Las características de los diferentes estados de la materia y las teorías	*C **1**:* **CE3:** Demostrar que conoce las características y comportamiento de los

utilizadas para describirlos.	diferentes estados de la materia y las teorías empleadas para describirlos.
Los principios de la mecánica cuántica y su aplicación a la descripción de la estructura y propiedades de los átomos y moléculas.	*C **1**:* **CE5:** Demostrar que conoce los principios de la Mecánica Cuántica y su aplicación a la descripción de la estructura y propiedades de átomos y moléculas.

COMPETENCIAS Y HABILIDADES COGNITIVAS	
El proceso de aprendizaje debe permitir a los titulados de grado demostrar:	
Capacidad para aplicar dicho conocimiento y comprensión a la solución de problemas comunes cualitativos y cuantitativos.	*C **1**:* **CE14:** Resolver problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados. *C **2**:* **CE15:** Reconocer y analizar nuevos problemas y planear estrategias para solucionarlos. *C 3**:*** **CE24**:Comprensión de los aspectos cualitativos y cuantitativos de los problemas químicos.
Capacidad para el cálculo y el procesamiento de datos, relacionados con información y datos de química.	*C **1**:* **CE14:** Resolver problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados. *C **2**:* **CE15:** Reconocer y analizar nuevos problemas y planear estrategias para solucionarlos.

COMPETENCIAS GENERALES	
El proceso de aprendizaje debe permitir a los titulados de grado demostrar:	
Capacidad para aplicar conocimiento práctico para la resolución de problemas relacionados con información cualitativa y cuantitativa.	*C **1**:* **CG4:** Resolver problemas de forma efectiva. *C **2**:* **CE14:** Resolver problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados. *C **3**:* **CE22:** Relacionar teoría y experimentación. *C **4**:* **CE23:** Reconocer y valorar los procesos químicos en la vida diaria. *C 5:* **CE24** Comprensión de los aspectos cualitativos y cuantitativos de los problemas químicos.
Capacidades de cálculo y aritméticas, incluyendo aspectos tales como error de análisis, estimaciones de órdenes de magnitud, y uso correcto de las unidades.	*C **1**:* **CG1:** Desarrollar capacidad de análisis, síntesis y razonamiento crítico. *C **2**:* **CG2:** Demostrar capacidad inductiva y deductiva. *C **n**:* **CG4:** Resolver problemas de forma efectiva.
Habilidades de planificación y gestión del tiempo.	• *C **1**:* **CG1:** Desarrollar capacidad de análisis, síntesis y razonamiento crítico. *C **2**:* **CG3:** Demostrar capacidad de gestión y dirección, espíritu emprendedor, iniciativa, creatividad, organización, planificación, control, liderazgo, toma de decisiones y negociación. *C **n**:* **CG4:** Resolver problemas de forma efectiva.

Competencias de comunicación oral y escrita, en uno de los principales idiomas europeos, además del idioma del país de origen	• *C **1**:* **CG5:** Demostrar capacidad de trabajo en equipo incluyendo equipos de carácter interdisciplinar y en un contexto internacional. *C **2**:* **CG7:** Comprometerse con la ética, los valores de igualdad y la responsabilidad social como ciudadano y como profesional. *C **n**:* **CT2:** Poseer habilidades básicas en tecnologías de la información y comunicación y gestionar adecuadamente la información obtenida.
Competencias de estudio necesarias para el desarrollo profesional. Éstas incluirán la habilidad de trabajar de forma autónoma.	*C **1**:* **CG3:** Demostrar capacidad de gestión y dirección, espíritu emprendedor, iniciativa, creatividad, organización, planificación, control, *C **2**:* **CG5:** Demostrar capacidad de trabajo en equipo incluyendo equipos de carácter interdisciplinar y en un contexto internacional. *C **3**:* **CG8:** Aprender de forma autónoma. *C **n**:* **CG9:** Demostrar capacidad para adaptarse a nuevas situaciones.

- 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 polielectrónico
- Utilizar métodos aproximados para resolver la ecuación de Schrödinger de sistemas polielectrónicos: 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 polielectrónicos
- 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 OMs 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 poliectrónicos

Átomos poliectrónicos: 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 pi-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. Emisión láser

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	51,00	100
Tutorías regladas	9,00	100
Estudio y trabajo autónomo	90,00	0
TOTAL	**150,00**	

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.

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 (60%) y problemas (40%) numéricos los cuales tratan sobre los conceptos básicos impartidos en clase. Para poder hacer media entre las partes de Teoría y Problemas, la nota obtenida en cada una de las partes ha de ser mayor o igual a 4 sobre 10. El examen será el mismo para todos los grupo
- 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 calificación mínima del examen escrito deberá ser igual o superior a 4,5 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 tratarán 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 (60%) y problemas numéricos (40%) los cuales tratarán sobre los conceptos básicos impartidos en clase. Para poder hacer media entre las partes de Teoría y Problemas, la nota obtenida en cada una de las partes ha de ser mayor o igual a 4 sobre 10. 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.W., de PAULA,J., Química Física, 8ª ed., Ed. Médica Panamericana, 2008. ISBN 9789500612487
- LEVINE, I.N., Fisicoquímica, 5ª ed., McGraw-Hill, 2004. ISBN 9788448137861 (v.1) ISBN 978844137878 (v.2)
- ENGEL, T. y REID, P. Química Física, Pearson Education, 2006 ISBN 10-84-7829-077-X
- ATKINS, P. W, de PAULA, J., Química Física, Physical Chemistry, 9ª ed., Oxford University Press, 2010. ISBN 97801995437878
- LEVINE, I. N., Physical Chemistry, 6ª ed., McGraw-Hill, 2008. ISBN 9780072538625 (v.1) ISBN 9780071276368 (v.2)

Complementarias

- BERTRAN, J. y col., Química Cuántica: Fundamentos y aplicaciones computacionales, 2ª ed., Síntesis, 2002.
- HANNA, W., Mecánica Cuántica para Químicos, Fondo Educativo Interamericano, 1985.
- 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.
- BROWN, J. M., Molecular Spectroscopy, Oxford University Press, 1998.
- BANWELL, C. N. y McCASH, E. M., Fundamentals of Molecular Spectroscopy, 4ª ed., McGraw-Hill, 1994.

- PLANELLES, J. CLEMENTE, I. y GABRIEL, J., Espectroscòpia, Publicacions de la Universitat Jaume I, 2002.
- DIAZ PEÑA, M. y ROIG MUNTANER, A., Química Física, Vol. 1, Alhambra, 1972.
- CRUZ-GARRITZ, D., CHAMIZO, J. A. y GARRITZ, A., Estructura atómica: un enfoque químico, Addison-Wesley Iberoamericana, 1987.
- LEVINE, I.N., Química Cuantica, 5ª ed., Prentice Hall, 2001.
- REQUENA, A. y ZUÑIGA, J., Espectroscopia, Pearson Prentice Hall, 2003.
- HOLLAS, J. M., Modern Spectroscopy, 2ª ed., John Wiley & Sons, 1992.
- BARROW, G. M., Introduction to Molecular Spectroscopy, McGraw-Hill, 1962.

ADENDA COVID-19

Esta adenda solo se activará si la situación sanitaria lo requiere y previo acuerdo del Consejo de Gobierno