

**FITXA IDENTIFICATIVA****Dades de l'Assignatura**

Codi	36451
Nom	Química Física II
Cicle	Grau
Crèdits ECTS	6.0
Curs acadèmic	2022 - 2023

Titulació/titulacions

Titulació	Centre	Curs	Període
1110 - Grau de Química	Facultat de Química	3	Primer quadrimestre

Matèries

Titulació	Matèria	Caràcter
1110 - Grau de Química	7 - Química Física	Obligatòria

Coordinació

Nom	Departament
ORTI GUILLEN, ENRIQUE	315 - Química Física

RESUM

Amb l'assignatura de *Química Física II* es pretén, essencialment, que l'alumne adquirisca coneixements bàsics de dues parts fonamentals de la Química-Física, com són 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'establiran les bases necessàries perquè l'estudiant pugui abordar posteriorment amb èxit l'estudi de diferents parts de la Química i de la pròpia Química Física, que utilitzen habitualment els conceptes de Química Quàntica i Espectroscòpia.



CONEXEMENTS 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 tal de poder abordar amb èxit l'assignatura, són imprescindibles coneixements bàsics previs, del nivell exigint 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 combin

COMPETÈNCIES (RD 1393/2007) // RESULTATS DE L'APRENTATGE (RD 822/2021)

1110 - 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 públic 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.
- 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 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 quantitius 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 quantitius dels problemes químics.
- Que els estudiants sàprien 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.
- Posseir habilitats bàsiques en tecnologies de la informació i comunicació i gestionar adequadament la informació obtinguda.

RESULTATS D'APRENTATGE (RD 1393/2007) // SENSE CONTINGUT (RD 822/2021)

L'apartat anterior recull les competències contingudes en el document VERIFICA. En aquesta assignatura s'aborden part dels resultats d'aprenentatge de la matèria Química Física que permeten adquirir, tant coneixements específics de Química, com habilitats i competències cognitives i competències generals recomanades per l'EUROPEAN CHEMISTRY THEMATIC NETWORK (ECTN) per al Chemistry Eurobachelor® Label. A la següent taula es relacionen els resultats d'aprenentatge adquirits en l'assignatura de Química Física II relacionats amb les competències del grau en Química

CONEIXEMENTS ESPECÍFICS DE QUÍMICA	
El procés d'aprenentatge ha de permetre als titulats de grau demostrar:	
Principals aspectes de la terminologia química, nomenclatura, convenis i unitats.	Demostrar que coneix els aspectes principals de terminologia química, nomenclatura, convenis i unitats.(CE1)
Les característiques dels diferents	Demostrar que coneix les característiques i el



estats de la matèria i les teories utilitzades per a descriure'ls.	comportament dels diferents estats de la matèria i les teories usades per descriure'ls.(CE3)
Els principis de la mecànica quàntica i la seva aplicació a la descripció de l'estructura i propietats dels àtoms i molècules.	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.(CE5).

COMPETENCIAS Y HABILIDADES COGNITIVAS	
El proceso de aprendizaje debe permitir a los titulados de grado demostrar:	
Capacitat per a demostrar coneixement i comprensió dels fets, conceptes, principis i teories fonamentals relacionades amb els temes esmentats anteriorment.	Demostrar el coneixement i la comprensió dels fets essencials, dels conceptes, dels principis i de les teories relacionades amb les àrees de la química.(CE13).
Capacitat per al càlcul i el processament de dades, relacionats amb informació i dades de química.	Resoldre problemes qualitius i quantitius segons models desenvolupats prèviament.(CE14). Reconèixer i analitzar problemes nous i planejar estratègies per solucionar-los.(CE15).

COMPETENCIAS GENERALES	
El proceso de aprendizaje debe permitir a los titulados de grado demostrar:	
Capacitat per a aplicar coneixement pràctic per a la resolució de problemes relacionats amb informació qualitativa i quantitativa.	Resoldre problemes de forma efectiva.(CG4). Resoldre problemes qualitius i quantitius segons models desenvolupats



	<p>prèviament.(CE14).</p> <p>Relacionar teoria i experimentació.(CE22).</p> <p>Reconèixer i valorar els processos químics en la vida diària.(CE23).</p> <p>Comprendre els aspectes qualitius i quantitius dels problemes químics.(CE24).</p>
Capacitats de càlcul i aritmètiques, incloent aspectes tals com error d'anàlisi, estimacions d'ordres de magnitud, i ús correcte de les unitats.	<p>Desenvolupar capacitat d'anàlisi, síntesi i raonament crític. (CG1).</p> <p>Demostrar capacitat inductiva i deductiva.(CG2).</p> <p>Resoldre problemes de forma efectiva.CG4).</p>
Habilitats de planificació i gestió del temps.	<p>Desenvolupar capacitat d'anàlisi, síntesi i raonament crític. (CG1).</p> <p>Demostrar capacitat de gestió i direcció, esperit emprenedor, iniciativa, creativitat, organització, planificació, control, lideratge, presa de decisions i negociació.(CG3).</p> <p>Resoldre problemes de forma efectiva.CG4).</p>
Competències de comunicació oral i escrita, en un dels principals idiomes europeus, a més de l'idioma del país d'origen.	<p>Demostrar capacitat de treball en equip incloent equips de caràcter interdisciplinari i en un context internacional.(CG5).</p> <p>Comprometre's amb l'ètica, els valors d'igualtat i la responsabilitat social com a ciutadà i com professional.(CG7).</p> <p>Expressar-se correctament, tant en forma oral com escrita, en qualsevol de les llengües oficials de la Comunitat Valenciana.(CT1).</p> <p>Que els estudiants puguen transmetre informació, idees, problemes i solucions a un públic tant especialitzat com no especialitzat.(CB4).</p> <p>Posseir habilitats bàsiques en tecnologies de</p>



	la informació i comunicació i gestionar adequadament la informació obtinguda (CT2).
--	---

- 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 tri-dimensional 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 les seues 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 al moviment de rotació d'un rotor diatòmic
- Plantejar la resolució de l'equació de Schrödinger per a l'àtom d'hidrogen, demostrant que pot separar-se 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 el Hamiltonià d'un àtom polieletrònic
- Utilitzar mètodes aproximats per resoldre l'equació de Schrödinger de sistemes polieletrònics: 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 de 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 polieletrònics
- 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 obtingudes amb el mètode aproximat OM-CLOA
- Descriure l'aplicació del mètode OM-CLOA en la molècula d'hidrogen



DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

1. Conceptes bàsics. Principis de la Mecànica Quàntica

Desenvolupament de la teoria quàntica. Dualitat ona-corpúscle. 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 d'hidrogen

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 de spin.

4. Àtoms polielectrònics

Àtoms polielectrònics: plantejament general. Mètodes aproximats. Àtom d'Heli. Aproximació orbital. Principi de anti-simetria. 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 pi-electrònics. Mètode de Hückel.

6. Fonaments d'Espectroscòpia

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

7. Espectroscòpies de Rotació i Vibració

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	51,00	100
Tutories reglades	9,00	100
Estudi i treball autònom	90,00	0
TOTAL	150,00	

METODOLOGIA DOCENT

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

- les classes teòriques
- les tutories grupals

Pel que fa a les primeres, en elles s'oferirà una visió global del tema tractat i s'incidirà 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 dedicaran al plantejament i resolució de problemes i qüestions, les quals permetran identificar els elements i conceptes essencials de cada tema. Per a aquestes sessions, es proporcionarà una llista de qüestions i problemes que servirà per reforçar els coneixements i exercitar-se en cadascun dels aspectes tractats. L'alumne/a haurà de lliurar resolts els problemes i qüestions que el Professor indique.

AVALUACIÓ

S'utilitzaran els següents sistemes d'avaluació:

- Proves consistents en Exàmens Escrits, Orals i/o Pràctics
- Avalució de les sessions de tutories grupals, seminaris, elaboració de treballs i/o exposicions orals
- Avalució 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 tindrà en compte tots els aspectes exposats en l'apartat de metodologia d'aquesta guia docent.

Modalitat A:

PRIMERA CONVOCATÒRIA

La qualificació final constarà de:

L'examen (75%), que consistirà en una sèrie de qüestions teòriques i problemes numèrics, els quals tractaran sobre els conceptes bàsics impartits a classe. L'examen serà el mateix per a tots els grups.

- Avaluació contínua (25%), que contempla proves d'avaluació 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 entrega d'exercicis i qüestions, i l'avaluació contínua de cada alumne basada en la participació i grau d'implicació en el procés d'ensenyament-aprenentatge. **Únicament en casos excepcionals i en el termini establert pels professors, es podrà renunciar a l'avaluació contínua.**

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

SEGONA CONVOCATÒRIA

En la segona convocatòria els estudiants realitzaran un examen escrit consistent en una sèrie de qüestions teòriques i problemes numèrics, els quals tractaran sobre els conceptes bàsics impartits a classe. L'examen serà el mateix per a tots els grups. La qualificació final, incloent l'avaluació contínua, es realitzarà utilitzant la mateixa ponderació que en la primera convocatòria. La qualificació global mínima per a aprovar l'assignatura és 5,0 sobre 10.

**Modalitat B**

Aquesta modalitat únicament s'acceptarà en aquells casos molt excepcionals en els que el professor haja acceptat la renúncia a l'avaluació contínua.

PRIMERA I SEGONA CONVOCATÒRIA

L'estudiant podrà acollir-se a ser avaluat únicament amb un examen que, tant en primera com en segona convocatòria, consistirà en una sèrie de qüestions teòriques i problemes numèrics, els quals tractaran sobre els conceptes bàsics impartits a classe. L'examen serà el mateix per a tots els grups. La qualificació global mínima per a aprovar l'assignatura és 5,0 sobre 10.

REFERÈNCIES**Bàsiques**

- ATKINS, P.W., de PAULA, J., Química Física, 8^a ed., Ed. Médica Panamericana, 2008. ISBN 9789500612487
- LEVINE, I.N., Fisicoquímica, 5^a 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, 9^a ed., Oxford University Press, 2010. ISBN 97801995437878
- LEVINE, I. N., Physical Chemistry, 6^a ed., McGraw-Hill, 2008. ISBN 9780072538625 (v.1) ISBN 9780071276368 (v.2)

Complementàries

- BERTRAN, J. y col., Química Cuántica: Fundamentos y aplicaciones computacionales, 2^a 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, 2^aed, 2010. www.uji.es/bin/publ/edicions/quimicaq.pdf.
- McQUARRIE, D. A., Quantum Chemistry, 2^a 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, 4^a 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 atòmica: un enfoque químic, Addison-Wesley Iberoamericana, 1987.
- LEVINE, I.N., Química Cuántica, 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.