

# Grado en Química

## Curso Tercero

### 1. Identificación de la asignatura

<b>NOMBRE</b>	Química Física II	<b>CÓDIGO</b>	GQUIMI01-3-002
<b>TITULACIÓN</b>	Graduado o Graduada en Química	<b>CENTRO</b>	Facultad de Química
<b>TIPO</b>	Obligatoria	<b>Nº TOTAL DE CREDITOS</b>	6.0
<b>PERIODO</b>	Primer Semestre	<b>IDIOMA</b>	Español
<b>COORDINADOR/ES</b>	<b>EMAIL</b>		
FRANCISCO MIGUELEZ EVELIO	evelio@uniovi.es		
<b>PROFESORADO</b>	<b>EMAIL</b>		
FRANCISCO MIGUELEZ EVELIO	evelio@uniovi.es		
García Granda Santiago	sgg@uniovi.es	(English Group)	

### 2. Contextualización

*Química Física II* (QFII) es una asignatura de tercer curso del Grado en Química. Es la segunda asignatura teórica de la materia Química Física e incluye contenidos de introducción a la Mecánica Cuántica, Química Cuántica, Espectroscopia molecular y Difractometría. Las primeras nociones de Química Cuántica del Grado en Química se introducen en *Química General*, de primer curso, que es necesario haber superado para cursar QFII. Algunos de los contenidos de las materias de Matemáticas (álgebra lineal y cálculo diferencial e integral) y Física (mecánica, ondas y electromagnetismo) son herramientas imprescindibles para abordar la materia de Química Física, en particular para el tratamiento de los modelos cuánticos y su aplicación a la espectroscopia y la difracción (contenidos específicos de QFII).

Respecto al resto de asignaturas de la materia Química Física, existe una relación directa con la Termodinámica Estadística de *Química Física III* (tercer curso, segundo semestre), en la que intervienen, por ejemplo, los niveles de energía microscópicos para evaluar las funciones de partición.

La conexión con la Química Analítica se produce a través de las técnicas analíticas espectroscópicas, tratadas en *Química Analítica II*, que requieren los conocimientos químico físicos de espectroscopia impartidos en QFII. El tratamiento químico físico de la espectroscopia es también necesario en la identificación de sustancias: el sello vibracional característico de ciertos grupos funcionales en el espectro infrarrojo, la información detallada de los acoplamientos entre espines en la resonancia magnética nuclear, o la simple comparación de espectros de cualquier tipo con patrones conocidos, constituyen herramientas poderosas en el ámbito de la Química Orgánica e Inorgánica. La metodología introducida por la Química Cuántica juega además un papel fundamental en estas dos áreas químicas; por ejemplo, en la aplicación de la teoría de orbitales moleculares a la estructura y reactividad orgánicas (*Química Orgánica I y II*) y a la formación, estructura y estabilidad de complejos inorgánicos y organometálicos. Por último, la importancia de las técnicas de difracción en la caracterización de la estructura de los materiales cristalinos relaciona los contenidos introducidos en QFII con *Bioquímica* y *Química de los Materiales*, del último curso del Grado. No obstante, según recoge la Memoria de Verificación, ninguna asignatura del Grado en Química requiere

haber superado QFII para poder ser cursada.

### 3. Requisitos

Los requisitos para cursar QFII son los mínimos contemplados para cursar cualquier asignatura de la materia Química Física: haber superado todas las asignaturas de las materias de Química (Química General y Operaciones Básicas de Laboratorio y Herramientas Informáticas) y de Física (Física General I y Física General II) y una asignatura de la materia de Matemáticas (Matemáticas).

### 4. Competencias y resultados de aprendizaje

#### Competencias generales:

- Demostrar capacidad de análisis y síntesis (CG-1).
- Resolver problemas de forma efectiva (CG2).
- Poseer conocimientos de informática relativos al ámbito de la Química (CG-3).
- Aprender de forma autónoma (CG-9).
- Desarrollar el razonamiento crítico (CG-17).

#### Competencias específicas (conocimientos):

- Relacionar las propiedades macroscópicas con las de los átomos y moléculas individuales (CE-2).
- Aplicar los principios de la mecánica cuántica en la descripción de la estructura y propiedades de átomos y moléculas (CE-12).
- Adquirir las bases para aplicar y evaluar la interacción radiación-materia, los principios de la espectroscopia y las principales técnicas de investigación estructural (CE-13)

#### Competencias específicas (habilidades):

- Resolver problemas cuantitativos y cualitativos según modelos previamente desarrollados (CE-20).
- Adquirir habilidad para evaluar, interpretar y sintetizar información química (CE-22).
- Procesar y computar datos, en relación con la información y datos químicos (CE-24).
- Interpretar datos procedentes de observaciones y medidas de laboratorio en términos de significado y la teoría que soporta (CE-30).
- Utilizar correctamente los métodos inductivo y deductivo en el ámbito de la química (CE-32).
- Realizar cálculos y análisis de error con utilización correcta de magnitudes y unidades (CE-35).
- Realizar, presentar y defender informes científicos tanto de forma escrita como oral ante una audiencia (CE-36).

#### Resultados de aprendizaje:

- Consultar y utilizar información científica de forma eficaz.
- Reconocer y analizar nuevos problemas en el ámbito de la Química y plantear estrategias para solucionarlos.

- Elaborar y presentar correctamente un informe tanto de forma oral como escrita.
- Manejar programas informáticos en el ámbito de la Química Física.
- Demostrar conocimiento y comprensión de los hechos, conceptos, principios y teorías relacionados con la química cuántica y la espectroscopia y su aplicación a la resolución de problemas.
- Relacionar los fundamentos de las técnicas analíticas, espectroscópicas y de investigación estructural con sus aplicaciones.

## 5. Contenidos

**Lección 1. Los postulados de la mecánica cuántica.** Antecedentes de la mecánica cuántica. La función de onda. Operadores. Valores propios y medida. Valores esperados. Ecuación de Schrödinger.

**Lección 2. Problemas de una y dos partículas con solución analítica.** La partícula libre. La partícula en una caja. El oscilador armónico. Momento angular de una partícula. El rotor rígido. El átomo hidrogenoide.

**Lección 3. Teoría atómica: Átomo de dos electrones.** Teorema variacional. Método de variaciones lineal. Métodos perturbativos. Átomo de He. Spin y principio de Pauli.

**Lección 4. Teoría atómica: Átomos de más de dos electrones.** Acoplamiento de momentos angulares. Momento angular L y S de un átomo. Determinantes de Slater. Términos de Russell-Saunders. Reglas de Hund. El método de Hartree-Fock. Acoplamiento spin-órbita. Estructura electrónica fina de un átomo.

**Lección 5. Estructura electrónica molecular.** Aproximación de Born-Oppenheimer y ecuación electrónica. La molécula ion  $H_2^+$ . La molécula  $H_2$ : método de Heitler-London y de Mulliken-Hund. El método LCAO en moléculas lineales. Método de orbitales moleculares en moléculas no lineales. Hibridación. Propiedades eléctricas y magnéticas de las moléculas.

**Lección 6. Espectroscopias de rotación y vibración.** Absorción y emisión de radiación electromagnética. Probabilidad de transición de Einstein. Reglas de selección. Movimiento nuclear de moléculas diatómicas. Reglas de selección roto-vibracionales. Espectros rotacionales de moléculas diatómicas. Espectros de rotación-vibración. Espectroscopia Raman. Movimiento nuclear en moléculas poliatómicas. Espectro rotacional del trompo simétrico y asimétrico. Espectroscopia de microondas. Simetría molecular y vibraciones: modos normales de vibración. Reglas de selección. Anarmonicidad.

**Lección 7. Espectroscopia electrónica.** Espectros electrónicos y ley de Lambert-Beer. Principio de Franck-Condon. Absorción, fluorescencia y fosforescencia. Disociación y predisociación. Lasers: principio, tipos y aplicaciones en química. Espectroscopia fotoelectrónica.

**Lección 8. Resonancias magnéticas.** Resonancia magnética nuclear: momento magnético nuclear y reglas de selección. Desplazamiento químico. Constante de apantallamiento. Acoplamiento spin-spin. Resonancia de spin electrónico.

**Lección 9. Difracción y sus aplicaciones.** Introducción. Teoría general de la difracción: introducción a la dispersión elástica de partículas (fotones, neutrones, electrones) por la materia. Factor de estructura. Ecuaciones de Laue y Bragg. Difracción por monocristales. Método de polvo cristalino. Espectroscopia de rayos-X. Introducción a las técnicas de absorción de rayos X.

## 6. Metodología y plan de trabajo

Se plantean tres tipos de actuaciones docentes: las clases expositivas, las clases de problemas o prácticas de aula y los seminarios tutorados o tutorías grupales.

Las **clases expositivas** (42 horas) desarrollarán el programa teórico de la asignatura. En dichas clases el profesor presenta y discute la materia objeto de estudio, haciendo especial hincapié en los aspectos de mayor relevancia y dificultad, integrando aspectos teóricos y ejemplos para facilitar la comprensión de la materia. Por ello, es muy recomendable que el alumno asista regularmente a clase aunque, obviamente, es necesario que complemente esta asistencia con el posterior estudio del material recomendado en el aula.

En **las prácticas de aula** (7 horas) se llevará a cabo la aplicación específica de los conocimientos adquiridos por los estudiantes en las clases expositivas, complementándose la integración entre aspectos teóricos y ejemplos señalada en el párrafo anterior. El alumno dispondrá, con antelación a su discusión en el aula, de los enunciados de los correspondientes problemas numéricos y cuestiones, siendo esencial que intente resolverlos por su cuenta antes de que sean tratados en clase.

En las **Tutorías Grupales** (4 horas), los estudiantes dispondrán con suficiente antelación de los enunciados de las cuestiones y ejercicios que deben resolver de manera individual, o colectiva, antes de la tutoría. En el desarrollo de ésta el alumno expondrá los ejercicios propuestos y el profesor aclarará las dudas y problemas que los estudiantes hayan podido encontrar en la resolución de las tareas propuestas.

Todos los materiales que se emplean en el desarrollo de las distintas actividades del curso estarán a disposición de los alumnos en formato electrónico en el Campus Virtual.

La planificación temporal de las actividades se detalla a continuación, indicando el número de horas de cada actividad presencial, y no presencial, asociadas a cada una de las lecciones.

	L1	L2	L3	L4	L5	L6	L7	L8	L9	Total	%
CE	5	4	4	4	5	6	5	4	5	42	28,00
PA	1,0	1,0	1,0	1,0	0,5	1,0	0,5	0,5	0,5	7	4,66
TG										4	2,66
OA										4	2,66
SE										3	2,00
										<b>60</b>	<b>40,00</b>
TNPI	14	10	10	10	10	10	8	8	10	90	60,00
										<b>150</b>	<b>100,00</b>

CE: Clases Expositivas, PA: Prácticas de Aula, TG: Tutorías Grupales, OA: Otras Actividades, SE: Sesiones de Evaluación, TNPI: Trabajo No Presencial Individual.

## 7. Evaluación del aprendizaje de los estudiantes

Para la calificación final se tendrán en cuenta los siguientes aspectos: (i) **evaluación continua** del trabajo del alumno (mediante dos pruebas escritas: la primera, de la parte de la asignatura introducida desde su inicio hasta el último viernes de octubre de 2016, y la segunda, de la parte de la asignatura introducida desde la correspondiente al primer examen hasta el primer viernes de diciembre de 2016. Las pruebas tendrán lugar inmediatamente después de esas fechas en una de las horas dedicadas a Prácticas de Aula, 30% de la nota; (ii) **examen final escrito** (examen de toda la asignatura al finalizar el semestre, dentro del calendario establecido), 60% de la nota; y (iii) **trabajos individuales** presentados en las Tutorías Grupales, 10% de la nota.

Para aprobar la asignatura en la convocatoria de enero es necesario cumplir la condición (1) o la condición (2):

- **La condición (1)** es obtener una nota global (suma pesada de las notas de la evaluación continua, del examen final escrito y de los trabajos individuales) igual o superior a 5,0 sobre 10,0, siempre que en cada una de las pruebas escritas parciales se obtenga una nota igual o superior a 3,0 sobre 10,0 y que en el examen escrito final se obtenga una nota igual o superior a 3,5 sobre 10,0. Si en alguna de las pruebas escritas parciales se obtiene una nota inferior a 3,0 sobre 10,0, para aprobar la asignatura será necesario cumplir la condición (2).
- **La condición (2)** es obtener una nota en el examen final escrito igual o superior a 5,0 sobre 10,0.

Cuando se cumplan las dos condiciones, **la nota final asignada será la máxima entre (1) y (2)**.

En las convocatorias extraordinarias de **mayo y junio**, para aprobar la asignatura **deberá cumplirse la condición (2)**.

## 8. Recursos, bibliografía y documentación complementaria

### Libro de texto principal

- I. N. Levine, *Physical Chemistry*, Sixth Edition, McGraw-Hill (Boston, 2009).

### Bibliografía avanzada

- I. N. Levine, *Espectroscopia Molecular*, Editorial AC (Madrid, 1980).
- C. Giacovazzo, *Fundamentals of Crystallography*, 3<sup>rd</sup> edition, Oxford University Press / International Union of Crystallography (Oxford, 2011).
- I. N. Levine, *Química Cuántica*, 5<sup>a</sup> edición, Pearson Educación, S. A. (Madrid, 2001).

### Otros textos complementarios del texto principal

- T. Engel y P. Reid, *Physical Chemistry*, Pearson Education, Inc. (San Francisco, 2006).
- D. A. McQuarrie y J. D. Simon, *Physical Chemistry: A Molecular Approach*, University Science Books (Sausalito, 1997).
- T. Engel, *Quantum chemistry and spectroscopy*, Pearson Education, Inc. (San Francisco, 2006).

