

Guía docente de la asignatura

**Química Física IV**

Fecha última actualización: 21/06/2021

Fecha de aprobación: 21/06/2021

<b>Grado</b>	Grado en Química		<b>Rama</b>	Ciencias			
<b>Módulo</b>	Química Física		<b>Materia</b>	Química Física			
<b>Curso</b>	3 <sup>o</sup>	<b>Semestre</b>	2 <sup>o</sup>	<b>Créditos</b>	6	<b>Tipo</b>	Obligatoria

**PRERREQUISITOS Y/O RECOMENDACIONES**

Haber superado las asignaturas Matemáticas, Física y Química Física I del grado en Químicas.

**BREVE DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS (Según memoria de verificación del Grado)**

Simetría molecular. La interacción entre la radiación electromagnética y la materia. Espectroscopías de absorción, emisión y de dispersión Raman. Espectroscopías de resonancia magnética de spin. Aplicación de las técnicas espectroscópicas al estudio de sistemas de interés químico físico.

**COMPETENCIAS ASOCIADAS A MATERIA/ASIGNATURA****COMPETENCIAS GENERALES**

- CG01 - El alumno deberá adquirir la capacidad de analizar y sintetizar
- CG02 - El alumno deberá adquirir la capacidad de organizar y planificar
- CG03 - El alumno deberá adquirir la capacidad de comunicarse de forma oral y escrita en la lengua oficial del Grado
- CG05 - El alumno deberá adquirir la capacidad de gestionar datos y generar información / conocimiento
- CG08 - El alumno deberá adquirir la capacidad de trabajar en equipo
- CG09 - El alumno deberá adquirir la capacidad de razonar críticamente

**COMPETENCIAS ESPECÍFICAS**

- CE01 - El alumno deberá saber o conocer los aspectos principales de terminología química, nomenclatura, convenios y unidades
- CE03 - El alumno deberá saber o conocer las características de los diferentes estados de la materia y las teorías empleadas para describirlos
- CE04 - El alumno deberá saber o conocer los tipos principales de reacciones químicas y



- las principales características asociadas a cada una de ellas
- CE06 - El alumno deberá saber o conocer los principios de termodinámica y sus aplicaciones en química
  - CE07 - El alumno deberá saber o conocer la cinética del cambio químico, incluyendo catálisis e interpretación mecanicista de las reacciones químicas
  - CE11 - El alumno deberá saber o conocer los principios de la mecánica cuántica y su aplicación en la descripción de la estructura y propiedades de átomos y moléculas
  - CE13 - El alumno deberá saber o conocer la relación entre propiedades macroscópicas y propiedades de átomos y moléculas individuales: incluyendo macromoléculas, polímeros, coloides y otros materiales
  - CE22 - El alumno deberá saber o conocer los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionados con todas las áreas de la Química
  - CE25 - El alumno deberá saber hacer o tener la capacidad de evaluar e interpretar datos e información Química
  - CE27 - El alumno deberá saber hacer o tener la capacidad de aplicar conocimientos químicos adquiridos a la resolución de problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados
  - CE29 - El alumno deberá saber hacer o tener la capacidad de presentar, tanto de forma escrita como oral, material y argumentación científica a una audiencia especializada
  - CE46 - El alumno deberá saber o conocer los fundamentos o principios de otras disciplinas necesarios para las distintas áreas de la Química.

## RESULTADOS DE APRENDIZAJE (Objetivos)

Entender los contenidos los contenidos de al asignatura detallados en el siguiente apartado.

## PROGRAMA DE CONTENIDOS TEÓRICOS Y PRÁCTICOS

### TEÓRICO

**Tema 1. Espectroscopía atómica (I).** 1.1. Apuntes históricos. 1.2. Espectro de emisión del átomo de hidrógeno. Balmer. Ecuación de Rydberg. 1.3. Series espectrales en los espectros de emisión de los metales alcalinos. 1.4. Principio de combinación de Rydberg-Ritz. Series espectrales en el átomo de hidrógeno. 1.5. Modelo de Bohr para el átomo de hidrógeno. 1.6. Espectros de emisión del helio y los alcalino térreos. 1.7. Espectros de emisión de otros átomos.

**Tema 2. Radiación electromagnética.** 2.1. Carácter ondulatorio de la radiación electromagnética. 2.2. Carácter corpuscular de la radiación electromagnética. 2.3. Espectroscopía fotoelectrónica.

**Tema 3. Difusión de la radiación electromagnética. Difracción.** 3.1. Descripción del fenómeno básico. 3.2. Difusión Rayleigh. 3.3. Descripción elemental de la red de difracción. 3.4. Difracción de rayos X. 3.5. Hipótesis de de Broglie. Carácter ondulatorio de la materia. Difracción de electrones.

**Tema 4. Fundamentos y conceptos generales.** 4.1. Introducción a la asignatura. 4.2. Experimento espectroscópico básico. 4.3. Fenómenos de interacción de la radiación electromagnética con la materia. 4.4. Momento dipolar eléctrico. 4.5. Elementos de la interpretación clásica de la absorción de radiación electromagnética. 4.6. Espectro de emisión de radiación térmica (cuerpo negro). Interpretación de Rayleigh Jeans. Ley de Planck para la densidad espectral de energía radiante. 4.7. Condición de frecuencia de Bohr. Consideraciones generales sobre la transición



espectroscópica. 4.8. Descripción fenomenológica (Einstein) de la absorción y emisión de la radiación electromagnética. 4.9. Interpretación mecano cuántica de las reglas de selección. 4.10. Emisión estimulada y láser. 4.11. Transformación de Fourier. Aplicaciones en espectroscopía.

**Tema 5. Elementos de Química Cuántica.** 5.1. Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. Repaso de su aplicación en la descripción de sistemas mecanocuánticos sencillos. 5.2. Método de perturbaciones. 5.3. Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo.

**Tema 6. Espectroscopía atómica (II).** 6.1. Estructura fina. Spin electrónico. 6.2. Interacción spin-órbita. 6.3. Momento angular total del hidrógeno y los alcalinos. Símbolo de término espectral. 6.4. Efecto Zeeman (emisión del átomo de hidrógeno en un campo magnético). 6.5. Espectroscopía de resonancia magnética nuclear. 6.6. Espectroscopía de resonancia de spin electrónico. 6.7. Láser de Helio-Neón. 6.8. Espectroscopía de fluorescencia de Rayos X y espectroscopía Auger.

**Tema 7. Espectroscopía molecular (I).** 7.1. Aproximación de Born Oppenheimer. 7.2. Rotación y vibración de la molécula diatómica. 7.3. Moléculas poliatómicas. 7.4. Espectroscopía Raman.

**Tema 8. Espectroscopía molecular (II).** 8.1. Espectroscopía electrónica de moléculas diatómicas y principio de Franck-Condon. 8.2. Espectroscopía electrónica de moléculas poliatómicas. 8.3. Fluorescencia y fosforescencia. 8.4. Actividad y rotación óptica.

## PRÁCTICO

Seminarios/Talleres.- Construcción de un espectroscopio elemental. Resolución de problemas numéricos. Actividades computacionales relacionadas con diferentes conceptos expuestos en el curso teórico.

Prácticas de Laboratorio.- Serie de Balmer: determinación de la constante de Rydberg. Espectroscopía UV-visible de una serie de colorantes conjugados. Determinación de la energía de disociación del yodo. Espectro de rotación-vibración del HCl. Experimentación básica en fluorescencia (desplazamiento de Stokes, energía 0-0, efecto espejo, "quenching"). Experimentación básica en RMN.

## BIBLIOGRAFÍA

### BIBLIOGRAFÍA FUNDAMENTAL

Espectroscopía, 2 volúmenes, Fundamentos y Métodos Avanzados (2020) Requena, Zúñiga



Espectroscopía: estructura y espectros atómicos (1972) Morcillo, Orza

Espectroscopía molecular: teoría, instrumentación y aplicaciones (2018) Gil, Núñez

### BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

Spectra of Atoms and Molecules (2018) Bernath

Modern Spectroscopy (2004) Hollas

Fundamentals of Molecular Spectroscopy (1994) Banwell, McCash

### METODOLOGÍA DOCENTE

- MDO1 Lección magistral/expositiva.
- MDO2 Resolución de problemas y estudios de casos prácticos.
- MDO3 Prácticas de laboratorio.
- MDO6 Seminarios.
- MDO8 Realización de trabajos en grupo.

### EVALUACIÓN (instrumentos de evaluación, criterios de evaluación y porcentaje sobre la calificación final)

#### EVALUACIÓN ORDINARIA

70% de la calificación final de un examen escrito susceptible de ser dividido en parciales.

14% de la calificación final resultante de la realización y presentación documental correcta de los seminarios y prácticas de laboratorio, así como de la cumplimentación de una libreta con las actividades propuestas por el profesor. 8% de la calificación final de la actitud notable del alumno en las clases teóricas, así como de resultados de pruebas específicas para evaluar el aprovechamiento en los seminarios y prácticas. 8% de la calificación final resultante de la evaluación de un trabajo sobre materiales extraordinarios (por ejemplo bibliográficos) puestos a su disposición durante el curso, o de otras actividades que se propongan.

#### EVALUACIÓN EXTRAORDINARIA

Un examen final de todos los contenidos impartidos para un 100% de la calificación.

#### EVALUACIÓN ÚNICA FINAL

Un examen final de todos los contenidos impartidos para un 100% de la calificación.

