

Guía docente de la asignatura

**Química Física IV (2911136)**

Fecha de aprobación: 21/06/2023

<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
- CE30 - El alumno deberá saber hacer o tener la capacidad de utilizar razonadamente las herramientas matemáticas e informáticas para trabajar con datos químicos
- 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: Interacción Materia-radiación electromagnética.

Mecanismos de interacción. Dispersión. Absorción y emisión de radiación. Coeficientes de Einstein. Regla de selección. Forma y anchura de las transiciones espectrales. Métodos experimentales.

Tema 2. Teoría de Grupos y simetría

Elementos y operaciones en simetría. Grupos puntuales de simetría. Teoría de las representaciones. Tabla de caracteres. Productos directos.

Tema 3: Espectroscopia de rotación

Modelos del rotor. Transiciones espectrales. Reglas de selección y transiciones espectrales. Estadística nuclear. Moléculas poliatómicas como trompos giratorios. Determinación de estructuras moleculares. Efecto Stark. Técnicas experimentales en espectroscopia de rotación.

Tema 4: Espectroscopia vibracional

Vibración en moléculas diatómicas. Anarmonicidad Interacción vibración-rotación. Espectros de vibración y vibración-rotación en moléculas diatómicas. La vibración en moléculas poliatómicas. Modos normales de vibración. Espectros de infrarrojo y Raman. Regla de selección.

Tema 5: Espectroscopia electrónica

Espectros electrónicos de átomos y moléculas. Moléculas diatómicas. Estructura de vibración: Principio de Franck-Condon. Energía de disociación. Estructura fina de rotación. Moléculas



poliatómicas. Tipos principales de transiciones. Fluorescencia y fosforescencia. Espectroscopia fotoeléctrica.

Tema 6: Espectroscopia de resonancia magnética nuclear

Interacción spin-campo magnético. Métodos experimentales. Desplazamientos químicos y apantallamientos. Acoplamientos spin-spin. El efecto Overhauser. RMN bidimensional. Resonancia de spin eléctrico.

## PRÁCTICO

1. Problemas y ejercicios sobre los temas teóricos
2. Asistencia a seminarios especializados

## BIBLIOGRAFÍA

### BIBLIOGRAFÍA FUNDAMENTAL

Atkins, P.W.; de Paula, J.; Keeler, J., Atkins Physical Chemistry, 11th, Oxford University Press, 2018  
Levine, I. N, Physical Chemistry, 6th ed., McGraw Hill, 2009

### BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

Levine, I. N, Quantum Chemistry, 7th, Pearson, 2014  
Hollas, J.M., Modern Spectroscopy, 4th, Wiley, 2004  
Banwell, C. N., Fundamentals of Molecular Spectroscopy, 4th, McGraw-Hill, 1994  
Requena, A. ; Zúñiga, J., Espectroscopía, 1, Pearson, 2004  
Gil Criado, M.; Núñez Barriocanal, J.L., Espectroscopía Molecular, 1, Garceta, 2018  
Bernath, P.J., Spectra of Atoms and Molecules, 4th, Oxford University Press, 2020  
Atkins, P. W. ; Friedman, R., Molecular Quantum Mechanics, 4th ed., Oxford University Press, 2005  
Atkins, P. W., Quanta : a handbook of concepts, 2nd ed., Oxford University Press, 1991

## METODOLOGÍA DOCENTE

- MD01 - Lección magistral/expositiva.
- MD02 - Resolución de problemas y estudios de casos prácticos.
- MD03 - Prácticas de laboratorio.
- MD06 - Seminarios.
- MD08 - Realización de trabajos en grupo.
- MD09 - Realización de trabajos individuales.

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

### EVALUACIÓN ORDINARIA



La calificación, evaluada globalmente, responderá a la puntuación ponderada de los diversos aspectos y actividades que componen el sistema de evaluación, de acuerdo a la siguiente ponderación para la calificación en convocatoria ordinaria:

Pruebas de evaluación escrita: 70% de la nota global

Otros aspectos susceptibles de evaluación (seminarios, redacción y exposición de trabajos, resolución de problemas, test entre otras): 30% de la nota global.

Será necesario alcanzar una calificación de 5 sobre 10 en la prueba de evaluación escrita para tener en cuenta el resto de calificaciones. Si se supera este umbral la calificación final de la asignatura será la media ponderada de las notas obtenidas en el examen (70%) y los otros aspectos susceptibles de evaluación (30%) siendo necesario alcanzar una calificación final de 5 para superar la asignatura. En caso de que no se supere el umbral mínimo señalado, la asignatura estará suspensa y la calificación final será la media ponderada de las actividades hasta un máximo de 4 puntos sobre 10. Teniendo en cuenta la Normativa de Evaluación y de Calificación de los Estudiantes de la UGR

([http://secretariageneral.ugr.es/bougr/pages/bougr112/\\_doc/examenes/](http://secretariageneral.ugr.es/bougr/pages/bougr112/_doc/examenes/)), como la asignatura contempla un examen final que supone el 70% del total de la ponderación de la calificación final de la asignatura, si el estudiante decidiera no realizarlo, figurará en el acta con la anotación de "No presentado".

### EVALUACIÓN EXTRAORDINARIA

Consistirá en un examen escrito único con preguntas de teoría y problemas, que constituirá el 100% de la calificación.

### EVALUACIÓN ÚNICA FINAL

Los alumnos que se acojan a la evaluación única final realizarán un examen final como única evaluación acerca de los contenidos de la asignatura.

Esta disposición puede consultarse en la "Normativa de Evaluación y de Calificación de los Estudiantes de la Universidad de Granada", aprobada por Consejo de Gobierno en su sesión extraordinaria de 20 de mayo de 2013 y modificada el 9 de noviembre de 2016.

