

Guía docente de la asignatura

Química Física IV (2911136)

Fecha de aprobación: 26/06/2024

Grado	Grado en Química	Rama	Ciencias				
Módulo	Química Física	Materia	Química Física				
Curso	3 ^o	Semestre	2 ^o	Créditos	6	Tipo	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. Espectroscopias de absorción, emisión y de dispersión Raman. Espectroscopias 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 de la 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. Láser.

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

Seminarios/Talleres (1 crédito) :

1. Problemas y ejercicios sobre los temas teóricos
2. Asistencia a seminarios especializados
3. Seminarios: Lectura y exposición por el estudiante de un artículo científico relacionado con los contenidos de la asignatura.

Prácticas de Laboratorio (1 crédito) :

El estudiante recibirá, al inicio del curso, información sobre las Normas de Seguridad y del correcto desarrollo de las prácticas. El documento estará disponible en la plataforma PRADO de la asignatura. Este documento es de obligada lectura y aplicación durante el desarrollo de las prácticas, el no cumplimiento del mismo por parte del estudiante exime de cualquier responsabilidad al profesor que imparte las prácticas y al departamento donde se desarrollen las mismas (es obligatoria la asistencia a todas las sesiones de prácticas).

- **Práctica de laboratorio 1:** Espectroscopia UV-Visible de compuestos orgánicos y de iones inorgánicos.
- **Práctica de laboratorio 2:** Elaborar curvas de calibración de espectrometría UV-Vis y de fluorescencia.
- **Práctica de laboratorio/ ordenador 3:** Obtención del espectro Infrarrojo de Transformada de Fourier (FTIR) y análisis de los mismos.

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



ENLACES RECOMENDADOS

- <http://prado.ugr.es> - Plataforma de Recursos de Apoyo a la Docencia, PRADO2, UGR. en la red.

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

Prácticas de Laboratorio: 10%. Este porcentaje corresponderá a la calificación de una prueba escrita sobre el temario práctico donde se evaluará el grado de comprensión de los experimentos realizados y se pondrá a prueba la capacidad de razonamiento crítico del alumnado. La **realización de las prácticas de laboratorio** será considerada **absolutamente obligatoria**.

Otros aspectos susceptibles de evaluación (seminarios, redacción y exposición de trabajos, resolución de problemas, test entre otras): 20% 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%), las prácticas de laboratorio (10%) y los otros aspectos susceptibles de evaluación (20%) 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/), 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 de todos los contenidos de la asignatura 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 que constará de dos partes diferenciadas: una de teoría y problemas que constituirá el 90% de la calificación final, y otra parte relativa a prácticas de laboratorio que representará el 10% de la calificación final. 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.

INFORMACIÓN ADICIONAL

Información de interés para estudiantado con discapacidad y/o Necesidades Específicas de Apoyo Educativo (NEAE): [Gestión de servicios y apoyos \(https://ve.ugr.es/servicios/atencion-social/estudiantes-con-discapacidad\)](https://ve.ugr.es/servicios/atencion-social/estudiantes-con-discapacidad).

