

## QUÍMICA FÍSICA II

### GUÍA DOCENTE CURSO 2019-20

<b>Titulación:</b>	Grado en Química			<b>702G</b>
<b>Asignatura:</b>	Química física II			<b>521</b>
<b>Materia:</b>	Química Física			
<b>Módulo:</b>	Fundamental			
<b>Modalidad de enseñanza de la titulación:</b>	Presencial	<b>Carácter:</b>	Obligatoria	
<b>Curso:</b>	3	<b>Créditos ECTS:</b>	6,00	<b>Duración:</b> Semestral (Primer Semestre)
<b>Horas presenciales:</b>	60,00		<b>Horas estimadas de trabajo autónomo:</b>	90,00
<b>Idiomas en que se imparte la asignatura:</b>	Español			
<b>Idiomas del material de lectura o audiovisual:</b>	Inglés, Español			

#### DEPARTAMENTOS RESPONSABLES DE LA DOCENCIA

QUÍMICA			<b>R112</b>
<b>Dirección:</b>	C/ Madre de Dios, 53	<b>Código postal:</b>	26006
<b>Localidad:</b>	Logroño	<b>Provincia:</b>	La Rioja
<b>Teléfono:</b>	941299620	<b>Fax:</b>	941299621
<b>Correo electrónico:</b>	dpto.dq@unirioja.es		

#### PROFESORADO PREVISTO

<b>Profesor:</b>	Puyuelo García, María Pilar		<b>Responsable de la asignatura</b>
<b>Teléfono:</b>	941299639	<b>Correo electrónico:</b>	pilar.puyuelo@unirioja.es
<b>Despacho:</b>	1203	<b>Edificio:</b>	CENTRO CIENTÍFICO TECNOLÓGICO
<b>Tutorías:</b>	Consultar		
<b>Profesor:</b>	Enriquez Palma, Pedro Alberto		
<b>Teléfono:</b>	941299638	<b>Correo electrónico:</b>	pedro.enriquez@unirioja.es
<b>Despacho:</b>	1202	<b>Edificio:</b>	CENTRO CIENTÍFICO TECNOLÓGICO
<b>Tutorías:</b>	Consultar		

#### DESCRIPCIÓN DE LOS CONTENIDOS

Espectroscopia Molecular: espectroscopias de absorción, emisión y de dispersión Raman.  
 Espectroscopia Molecular: espectroscopia de resonancia magnética.  
 Cinética Química.  
 Fotoquímica.  
 Experimentación en Espectroscopía Molecular y Cinética Química.

#### REQUISITOS PREVIOS DE CONOCIMIENTOS Y COMPETENCIAS PARA PODER CURSAR CON ÉXITO LA ASIGNATURA

##### Recomendados para poder superar la asignatura.

Se aconseja tener conocimientos y competencias adquiridas en las asignaturas:

Química Física I.  
 Complementos de Química.  
 Matemáticas I y Matemáticas II.  
 Física.

##### Asignaturas que proporcionan los conocimientos y competencias:

- Complementos de química
- Física
- Matemáticas I
- Matemáticas II
- Química física I

#### CONTEXTO

En esta asignatura se amplía la formación química física de los estudiantes del Grado de Química en los campos de la Espectroscopia Molecular óptica y de resonancia magnética, de la Cinética Química y de la Fotoquímica. La Espectroscopia Molecular se estudiará teniendo en cuenta los modelos químico cuánticos introducidos en la asignatura de Química Física I: Espectroscopia de rotación y vibración molecular, Espectroscopía electrónica y sus correspondientes

Espectroscopias Raman. Posteriormente, se introducirá la Espectroscopia de Resonancia Magnética, estudiando el efecto del campo magnético sobre las moléculas: Espectroscopia de resonancia magnética nuclear (RMN) y espectroscopia de espín electrónico (RSE).

En la parte dedicada a Cinética Química, se estudiará la relación entre los mecanismos de reacción y las ecuaciones cinéticas empíricas. A continuación, se estudiarán las teorías de las reacciones químicas que permiten calcular las constantes cinéticas de reacciones bimoleculares: Teoría de Colisiones (TC) y Teoría del Estado de Transición (TET).

Finalmente, en la parte dedicada a la Fotoquímica se introducirán los principales procesos primarios fotofísicos y fotoquímicos que puede sufrir una molécula excitada por absorción de luz. En este contexto, se introducirán los fundamentos de la emisión láser y su aplicación en el estudio de reacciones fotoquímicas.

## COMPETENCIAS

### Competencias generales

CGIT01: Ser capaz de analizar y sintetizar información.

CGIT02: Mostrar capacidad de organización y planificación.

CGIT03: Comunicar información de manera oral y escrita.

CGIT04: Comprender textos escritos en una segunda lengua relacionados con la propia especialidad

CGIT05: Usar las tecnologías de información y comunicación.

CGIT06: Resolver problemas

CGIP01: Trabajar en equipo.

CGIP03: Adquirir y aplicar el compromiso ético.

CGIP04: Razonar de manera crítica.

CGS02: Realizar un aprendizaje autónomo.

CGS03: Adaptarse a nuevas situaciones.

### Competencias específicas

CE01: Conocer la terminología química, nomenclatura, convenios y unidades.

CE03: Enumerar las características de los diferentes estados de la materia y conocer los modelos teóricos empleados para describirlos.

CE04: Identificar los principales tipos de reacciones químicas y sus características.

CE05: Conocer los principios de termodinámica y los fundamentos de la cinética y sus aplicaciones en Química.

CE06: Enunciar los principios de la química cuántica y aplicarlos a la descripción de la estructura atómica y molecular.

CE09: Identificar y describir las principales técnicas de caracterización estructural.

CE12: Relacionar las propiedades macroscópicas y propiedades de átomos y moléculas individuales, incluyendo macromoléculas (naturales y sintéticas), polímeros, coloides y otros materiales.

CE16: Demostrar el conocimiento y la comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionadas con las áreas de la Química.

CE17: Resolver problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados.

CE18: Reconocer y analizar nuevos problemas y plantear estrategias para solucionarlos.

CE19: Evaluar, interpretar y sintetizar datos e información química.

CE20: Valorar los riesgos en el uso de sustancias químicas y en los procedimientos de laboratorio.

CE21: Manipular con seguridad las sustancias químicas y los procedimientos correctos de gestión de residuos.

CE23: Manejar la instrumentación química estándar utilizada para investigaciones estructurales y separaciones.

CE24: Interpretar los datos procedentes de observaciones y medidas en el laboratorio en términos de su significación y de las teorías que la sustentan.

CE25: Procesar e informatizar datos químicos.

CE26: Reconocer e implementar buenas prácticas científicas de medida y experimentación.

CE27: Reconocer y valorar los procesos químicos en la vida diaria.

CE28: Relacionar la Química con otras disciplinas.

## RESULTADOS DEL APRENDIZAJE

Explicar el origen de los fenómenos espectroscópicos y el fundamento cuántico de las diferentes técnicas para la determinación de los diversos parámetros estructurales moleculares.

Interpretar cualitativa y cuantitativamente espectros moleculares utilizando los métodos teóricos relevantes, en términos de la estructura molecular y la termodinámica estadística.

Aprender los aspectos fundamentales de la cinética química tales como la relación entre la ecuación cinética y el mecanismo de reacciones complejas, las teorías de velocidades de reacción. Utilizar estos conocimientos para el análisis de datos experimentales y el cálculo de constantes cinéticas.

Comprender el origen de los procesos fotoquímicos. Cuantificar la magnitud o cinética de estos procesos en términos de los modelos estructurales o cinéticos relevantes.

Utilizar las principales técnicas instrumentales espectroscópicas empleadas en química y poder determinar a través del trabajo experimental la estructura molecular y propiedades estructurales de las moléculas.

Introducir al alumno en los conceptos y técnicas experimentales básicas en cinética química.

Tener capacidad de crítica y autocrítica en la obtención, análisis y presentación de datos experimentales.  
Comprender y utilizar la información bibliográfica y técnica referida a los fenómenos fisicoquímicos.  
Manejar programas informáticos de cálculo de propiedades microscópicas de la materia, y de programas de simulación.  
Reconocer la importancia de la Química Física y su impacto en la sociedad industrial y tecnológica.

## TEMARIO

### UNIDAD 1: Espectroscopia molecular: espectroscopias de absorción, emisión y de dispersión Raman

#### Tema 1: Interacción radiación/materia

Reglas de selección. Coeficientes de Einstein. Tiempo de vida radiante. Anchura espectral natural. Ley de Lambert-Beer.

#### Tema 2: Espectroscopia de rotación molecular

Momentos de Inercia y rotores. Estructura rotacional (rotor rígido y rotor no rígido). Espectro rotacional. Dispersión Raman

#### Tema 3: Espectroscopia de vibración molecular

Estructura y espectro vibracional de moléculas diatómicas (oscilador armónico y anarmónico). Energía de disociación.

Estructura vibracional-rotacional. Estructura y espectro vibracional de moléculas poliatómicas. Espectro Raman vibracional.

#### Tema 4: Espectroscopia electrónica

Estructura y espectro electrónico de moléculas diatómicas. Principio de Franck-Condon. Espectro electrónico de moléculas poliatómicas. Dinámica de estados electrónicos excitados.

### UNIDAD 2: Espectroscopia molecular: espectroscopias de resonancia magnética

#### Tema 5: Espectroscopias de Resonancia Magnética

Efectos del campo magnético sobre núcleos y electrones. Resonancia Magnética Nuclear (RMN). Resonancia de Espín Electrónico (RSE).

### UNIDAD 3: Cinética química

#### Tema 6: Cinética química empírica

Velocidad de reacción. Ecuaciones de velocidad de reacción. Reacciones elementales y complejas. Ecuación de Arrhenius.

#### Tema 7: Cinética de reacciones complejas

Tipos de reacciones complejas. Reacciones reversibles, paralelas y consecutivas. Métodos aproximados para el análisis de mecanismos de reacción. Aplicaciones.

#### Tema 8: Teorías de las reacciones químicas

Teoría de colisiones. Teoría del estado de transición. Ecuación de Eyring.

### UNIDAD 4: Fotoquímica

#### Tema 9: Cinética de reacciones fotoquímicas

Procesos fotofísicos primarios. Rendimiento cuántico primario. Tiempo de vida medio de fluorescencia y fosforescencia.

Procesos fotofísicos de transferencia de energía intermolecular. Procesos fotoquímicos primarios. Láseres.

**PRÁCTICAS de AULA INFORMÁTICA:** Resolución de problemas de Espectroscopia y Cinética química mediante la utilización de ordenadores.

**PRÁCTICAS de LABORATORIO:** Experimentación en el laboratorio de Química Física. Prácticas de espectroscopia IR, UV-VIS y RSE. Prácticas de Cinética química y de Fotoquímica.

## BIBLIOGRAFÍA

Tipo:	Título
Básica	G: Fisicoquímica, Levine (2004) <a href="#">Absys Biba</a>
Básica	G: Physical Chemistry, Atkins y de Paula (2006) <a href="#">Absys Biba</a>
Básica	G: Physical Chemistry, Levine (2002) <a href="#">Absys Biba</a>
Básica	G: Physical Chemistry, McQuarrie y Simon (1997) <a href="#">Absys Biba</a>
Básica	G: Química Física, Atkins y de Paula (2008) <a href="#">Absys Biba</a>
Básica	G: Química Física, Engel y Reid (2006) <a href="#">Absys Biba</a>
Básica	GP: Problemas de fisicoquímica, Levine (2005) <a href="#">Absys Biba</a>
Básica	GP: Student solutions manual Levine's Physical Chemistry (2002) <a href="#">Absys Biba</a>
Básica	GP: Students Solutions Manual Atkins' Physical Chemistry (2006) <a href="#">Absys Biba</a>

Básica	LAB: Experimentación Avanzada en Química Física, Diaz Baños y cols. (2004) <b>Absys Biba</b>
Básica	LAB: Experimentación en Química Física, Diaz Baños y cols.(2002) <b>Absys Biba</b>
Básica	LAB: Experimental Physical Chemistry, Halpern (2006) <b>Absys Biba</b>
Básica	LAB: Experiments in Physical Chemistry, Shoemaker et al.(2003) <b>Absys Biba</b>
Básica	LAB: Physical Chemistry: methods, techniques and experiments, Sime (1990) <b>Absys Biba</b>
Básica	LAB: Understanding lasers: an entry-level guide , Hecht (2008) <b>Absys Biba</b>
Complementaria	CQ: Cinética Química, Ureña (2001) <b>Absys Biba</b>
Complementaria	CQ: Fundamentos de Cinética Química, Logan (2000) <b>Absys Biba</b>
Complementaria	CQ: Reaction Kinetics, Pilling y Seakins (1995) <b>Absys Biba</b>
Complementaria	ESP: Basic atomic and molecular spectroscopy, Hollas (2002) <b>Absys Biba</b>
Complementaria	ESP: Espectroscopia molecular, Luaña y col (2002)
Complementaria	ESP: Fundamentals of molecular spectroscopy, Banwell (1994) <b>Absys Biba</b>
Complementaria	ESP: Principios básicos de Espectroscopia, Chang (1983) <b>Absys Biba</b>
Complementaria	ESP: Spectra of atoms and molecules, Bernath (2005) <b>Absys Biba</b>
Complementaria	ESPP: Problemas de espectroscopia molecular, Caballeira (2008) <b>Absys Biba</b>
Complementaria	FQ: Principles and applications of photochemistry, Wayne (1991) <b>Absys Biba</b>
Complementaria	FQ: Principles of molecular photochemistry, Turro (2009) <b>Absys Biba</b>
Complementaria	SIM: Symmetry and spectroscopy, Harris (1989) <b>Absys Biba</b>

#### Recursos en Internet

Journal of Chemical Education

<http://pubs.acs.org/journal/jceda8>

Journal of Physical Chemistry

<http://pubs.acs.org/journal/jpcafh>

Physical Chemistry Chemical Physics

<http://pubs.rsc.org/en/journals/journalissues/cp>

Journal of molecular spectroscopy

<http://www.sciencedirect.com/science/journal/00222852>

International Reviews in Physical Chemistry

<http://www.tandfonline.com/toc/trpc20/current>

Annual Review of Physical Chemistry

<http://www.annualreviews.org/journal/physchem>

## METODOLOGÍA

### Modalidades organizativas

Clases teóricas

Seminarios y talleres

Clases prácticas

Estudio y trabajo en grupo

Estudio y trabajo autónomo individual

### Métodos de enseñanza

Método expositivo - Lección magistral

Estudio de casos

Resolución de ejercicios y problemas

Aprendizaje basado en problemas

Aprendizaje orientado a proyectos

Aprendizaje cooperativo

Contrato de aprendizaje

## ORGANIZACIÓN

Actividades presenciales	Tamaño de grupo	Horas
Clases teóricas	Grande	34,00
Seminarios y talleres	Reducido	4,00
Clases prácticas de aula informática (asistencia obligatoria)	Informática	7,00
Clases prácticas de laboratorio (asistencia obligatoria)	Laboratorio	15,00



<b>Total de horas presenciales</b>	60,00
<b>Trabajo autónomo del estudiante</b>	<b>Horas</b>
Estudio autónomo individual o en grupo	50,00
Preparación de las prácticas y elaboración de cuaderno de prácticas	10,00
Preparación en grupo de trabajos, presentaciones (orales, debates, ...), actividades en biblioteca o similar	10,00
Resolución de ejercicios, cuestiones, trabajos de simulación u otros trabajos mediante actividades en aula informática.	20,00
<b>Total de horas de trabajo autónomo</b>	90,00
<b>Total de horas</b>	150,00

## EVALUACIÓN

Sistemas de evaluación	Recuperable	No Recup.
Informes y memorias de prácticas	10%	
Pruebas escritas	70%	
Técnicas de observación		10%
Sistemas de autoevaluación		10%
<b>Total</b>	100%	

## Comentarios

1. El material didáctico seleccionado se encontrará disponible en el aula virtual para todos los alumnos matriculados en esta asignatura.
2. Pruebas escritas (materia recuperable): Se realizarán dos exámenes parciales (5% cada uno) y un examen final (60%) en la primera convocatoria. Se realizará un único examen (70%) en la convocatoria de julio.
3. Informes y memorias de practicas (materia recuperable)(10%): Antes de cada sesión de prácticas de laboratorio se llenará un cuestionario previo en el laboratorio. Después de la sesión de prácticas, se elaborará un informe con los resultados obtenidos en la práctica realizada. Se valorarán los cuestionarios previos y los informes emitidos.
4. Autoevaluaciones (materia no recuperable)(10%)
5. Técnicas de observación (materia no recuperable) (10%): Se valorará la asistencia, con participación y aprovechamiento, a las actividades formativas presenciales de la asignatura.
6. *Para los estudiantes a tiempo parcial* (reconocidos como tales por la Universidad), las actividades de evaluación no recuperable podrán ser sustituidas por otras, a especificar en cada caso. Esta posibilidad se habilitará siempre y cuando la causa que le impida la realización de la actividad de evaluación programada sea la que ha llevado al reconocimiento de la dedicación a tiempo parcial.

## Criterios críticos para superar la asignatura

Para asegurar que el estudiante adquiere unos mínimos competenciales de la asignatura, se consideran criterios críticos para superar la asignatura:

1. Obtener un 5 (sobre 10) en el examen final de la asignatura.
2. Obtener un 8 (sobre 10) en técnicas de observación.
3. Obtener un 5 (sobre 10) en informes y memorias de prácticas.

En caso de no superar uno o varios de los criterios anteriores, la nota máxima que aparecerá en el acta será 4,0.