

QUÍMICA FÍSICA II

GUÍA DOCENTE CURSO 2014-15

Titulación:	Grado en Química			702G
Asignatura:	Química física II			521
Materia:	Química Física			
Módulo:	Fundamental			
Carácter:	Obligatoria	Curso:	3	Duración: Semestral
Créditos ECTS:	6,00	Horas presenciales:	60,00	Horas estimadas de trabajo autónomo: 90,00
Idiomas en que se imparte la asignatura:	Español			
Idiomas del material de lectura o audiovisual:	Inglés, Español			

DEPARTAMENTOS RESPONSABLES DE LA DOCENCIA

QUÍMICA	R112
Dirección:	C/ Madre de Dios, 51 Código postal: 26004
Localidad:	Logroño Provincia: La Rioja
Teléfono:	941299620 Fax: 941299621 Correo electrónico:

PROFESORADO PREVISTO

Profesor:	Puyuelo García, María Pilar	Responsable de la asignatura
Teléfono:	941299639	Correo electrónico: pilar.puyuelo@unirioja.es
Despacho:	1203	Edificio: EDIFICIO CIENTÍFICO TECNOLÓGICO Tutorías: Consultar
Profesor:	Enriquez Palma, Pedro Alberto	
Teléfono:	941299638	Correo electrónico: pedro.enriquez@unirioja.es
Despacho:	1202	Edificio: EDIFICIO CIENTÍFICO TECNOLÓGICO Tutorías: 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 Espectroscopia 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, Espectroscopia 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 electrónica (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, algunos tipos de láseres, 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.

Tema 10: Láseres en espectroscopia y fotoquímica

Principios generales de un láser. Tipos de láseres. Algunas aplicaciones en Química.

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) Absys Biba
Básica	G: Physical Chemistry, Atkins y de Paula (2006) Absys Biba
Básica	G: Physical Chemistry, Levine (2002) Absys Biba
Básica	G: Physical Chemistry, McQuarrie y Simon (1997) Absys Biba
Básica	G: Química Física, Atkins y de Paula (2008) Absys Biba
Básica	G: Química Física, Engel y Reid (2006) Absys Biba
Básica	GP: Problemas de fisicoquímica, Levine (2005) Absys Biba



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

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 prácticas de aula informática	Informática	7,00
Clases prácticas de laboratorio	Laboratorio	15,00

Clases teóricas	Grande	34,00
Seminarios y clases prácticas de aula	Reducido	4,00
Total de horas presenciales		60,00
Trabajo autónomo del estudiante		Horas
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
Total de horas de trabajo autónomo		90,00
Total de horas		150,00

EVALUACIÓN

Sistemas de evaluación	Recuperable	No Recup.
Informes y memorias de prácticas	10%	
Pruebas escritas	60%	10%
Escalas de actitudes		10%
Sistemas de autoevaluación		10%
Total	100%	

Comentarios

El material didáctico seleccionado se encontrará disponible en el aula virtual para todos los alumnos matriculados en esta asignatura.

Se realizarán dos exámenes parciales (5% cada uno) y un examen final (60%). Los exámenes parciales son pruebas no recuperables.

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

-La realización de las prácticas de laboratorio y la entrega de los correspondientes informes son obligatorias para superar la asignatura.

-La realización de las prácticas de aula informática y la entrega de los correspondientes informes son obligatorias para superar la asignatura.

-No se valorará con nota la asistencia a las clases de grupo grande de la asignatura. Sin embargo, para poder realizar los exámenes parciales será necesario asistir al menos a un 80% de las clases y participar activamente en las clases de resolución de problemas.

-Será necesario obtener un 5,0 sobre 10 en el examen escrito final para que se consideren en la evaluación global las notas obtenidas en los exámenes parciales, en las pruebas de autoevaluación y en las prácticas de laboratorio e informáticas.