

18-19

GRADO EN QUÍMICA
TERCER CURSO

GUÍA DE ESTUDIO PÚBLICA



QUÍMICA FÍSICA II: ESPECTROSCOPIA Y ESTADÍSTICA MOLECULAR

CÓDIGO 61033025



Ámbito: GUJ - La autenticidad, validez e integridad de este documento puede ser verificada mediante el "Código Seguro de Verificación (CSV)" en la dirección <https://sede.uned.es/valida/>



4DC015D9BA49802E2A0FDA680912D537

18-19

QUÍMICA FÍSICA II: ESPECTROSCOPIA Y
ESTADÍSTICA MOLECULAR
CÓDIGO 61033025

ÍNDICE

PRESENTACIÓN Y CONTEXTUALIZACIÓN
REQUISITOS Y/O RECOMENDACIONES PARA CURSAR LA
ASIGNATURA
EQUIPO DOCENTE
HORARIO DE ATENCIÓN AL ESTUDIANTE
TUTORIZACIÓN EN CENTROS ASOCIADOS
COMPETENCIAS QUE ADQUIERE EL ESTUDIANTE
RESULTADOS DE APRENDIZAJE
CONTENIDOS
METODOLOGÍA
SISTEMA DE EVALUACIÓN
BIBLIOGRAFÍA BÁSICA
BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA
RECURSOS DE APOYO Y WEBGRAFÍA



Nombre de la asignatura	QUÍMICA FÍSICA II: ESPECTROSCOPIA Y ESTADÍSTICA MOLECULAR
Código	61033025
Curso académico	2018/2019
Departamento	CIENCIAS Y TÉCNICAS FISCOQUÍMICAS
Título en que se imparte	GRADO EN QUÍMICA
Curso	TERCER CURSO
Tipo	OBLIGATORIAS
Nº ETCS	6
Horas	150.0
Periodo	SEMESTRE 1
Idiomas en que se imparte	CASTELLANO

PRESENTACIÓN Y CONTEXTUALIZACIÓN

El título de Graduado en Química tiene como finalidad la obtención de una formación general en esta disciplina, orientada a su preparación para el ejercicio de actividades de carácter profesional. La *Química Física II: Espectroscopía y Estadística Molecular* es la segunda asignatura integrante de la materia de Química Física y se imparte en el primer semestre del tercer curso, en el Plan de estudios del Grado en Química. Dentro de esta materia, la asignatura abarca los temas de: interacción entre la radiación electromagnética y la materia, espectroscopías de absorción y de emisión, espectroscopías de dispersión Raman, espectroscopías de resonancia magnética, láseres, teoría cinética, fenómenos de transporte y fundamentos de termodinámica estadística.

La asignatura *Química Física II*, se encuadra como asignatura obligatoria de 6 ECTS en el 3^{er} curso del Grado, impartándose en el primer semestre. Sus contenidos están directa o indirectamente relacionados con las asignaturas teóricas del primer y segundo curso. Destacan:

- entre las del primer curso: *Reacción Química* (termodinámica química, equilibrio químico, disoluciones, cinética química, ácidos y bases, equilibrio de solubilidad, electroquímica - equilibrio redox)
- entre las del segundo curso: *Termodinámica Química* (descripción termodinámica, calor y trabajo, principios, relaciones termodinámicas, etc.) y *Química Física I: Estructura atómica y molecular* (Fundamentos de mecánica cuántica. Introducción al estudio de sistemas sencillos. Átomos. Moléculas diatómicas. Elementos y grupos de simetría. Moléculas poliatómicas. Propiedades eléctricas y magnéticas).

De entre los resultados de aprendizaje que se pretenden para el módulo de Química aplicada y que contribuyen al futuro perfil profesional del estudiante cuando finalice sus estudios de Grado, la asignatura de Química Física II: Espectroscopía y Mecánica Molecular, puede ser especialmente necesaria para la consecución de los siguientes:

- Contactar con los problemas reales del químico.
- Aprender a tomar decisiones ante un problema concreto.
- Conocer las diferentes propiedades de la estructura molecular, así como las aplicaciones derivadas de la misma.



- Adquirir conocimientos sobre ámbitos concretos de la Química aplicada.

REQUISITOS Y/O RECOMENDACIONES PARA CURSAR LA ASIGNATURA

Es conveniente que el estudiante tenga unos conocimientos básicos de Termodinámica, Cinética, Equilibrios Químicos, Estructura Molecular al nivel que se estudian en los dos primeros cursos del grado.

Además, es fundamental tener una buena base de Física y Matemáticas, por lo que se recomienda también haber cursado y aprobado estas materias. En especial, se requieren nociones de álgebra matricial y de cálculo diferencial e integral, así como algunos conceptos esenciales de mecánica, ondas y electromagnetismo, todo lo cual se ha podido adquirir en las asignaturas de cursos anteriores, sin que a este nivel sean necesarios desarrollos más elevados.

Algunas *habilidades y destrezas de carácter práctico y habilidades de tipo instrumental* que pueden facilitar el estudio de la asignatura son las siguientes:

- Lectura comprensiva de textos científicos que incluyan desarrollos matemáticos y razonamientos físicos.
- Manejo de calculadora científica para realizar los cálculos numéricos requeridos en los ejercicios.
- Cambios de unidades.
- Búsqueda de información puntual en tablas de datos fisicoquímicos.
- Realización de resúmenes y fichas conceptuales o bibliográficas.
- Manejo de paquetes informáticos del tipo de procesador de textos (Word o similar) y de cálculos estadísticos especialmente de regresión lineal (Excel, Origin,...). Opcionalmente, de dibujo de moléculas (ChemDraw o similar), y si es posible de tratamiento cuántico de moléculas (Spartan, Gaussian,...).
- Conocimientos básicos de inglés que posibiliten la consulta de fuentes de conocimiento en este idioma que haya disponibles en libros, revistas, Internet, etc.

Otras *destrezas específicas de tipo matemático* son:

- Utilización de equivalencias entre expresiones trigonométricas.
- Cálculo de derivadas sencillas
- Cálculo de integrales sencillas
- Cambios de sistemas de coordenadas: por ejemplo de cartesianas a polares.



EQUIPO DOCENTE

Nombre y Apellidos
Correo Electrónico
Teléfono
Facultad
Departamento

CARMEN SANCHEZ RENAMAYOR
csanchez@ccia.uned.es
91398-7386
FACULTAD DE CIENCIAS
CIENCIAS Y TÉCNICAS FÍSICO-QUÍMICAS

HORARIO DE ATENCIÓN AL ESTUDIANTE

Tutorías virtuales

Tienen lugar a través de los Cursos Virtuales de forma telemática. En el curso virtual se puede interaccionar con Profesores Tutores y con el Equipo Docente a través de los distintos foros de que dispondrá el curso virtual. La figura del tutor es fundamental, por lo que si no tiene tutor asignado le rogamos que lo exponga en su Centro Asociado, pues son ellos los encargados de asignarle un tutor intercampus. Al inicio del curso se explicará la función de cada uno de estos foros existentes en el curso virtual.

Tutorías presenciales en el Centro Asociado

Consulte en su Centro Asociado si existen tutorías presenciales para esta asignatura.

Horario de atención del Equipo Docente

La forma de contactar con el Equipo Docente será preferentemente mediante el curso virtual en el que tendrá acceso tanto a los foros como al correo electrónico. Puede utilizar los foros para consultas públicas y el correo electrónico para consultas de tipo privado.

Las profesoras se encuentran en la Sede Central cuya dirección es:

Departamento de Ciencias y Técnicas Físicoquímicas
Facultad de Ciencias de la UNED
Paseo Senda del Rey, 9
28040 Madrid

El horario de guardia para la asignatura, excepto días festivos en la universidad, vacaciones y semanas de celebración de Pruebas Presenciales es:

Carmen Sánchez Renamayor

Despacho 310
Tel.: 91398-7386
Horario de Guardia: Miércoles de 16 a 20 horas
Correo electrónico: csanchez@ccia.uned.es

M^a Dolores Troitino Núñez

Despacho 306
Tel.: 91398-7388
Horario de Guardia: Jueves de 15 a 19 horas
Correo electrónico: mtroitino@ccia.uned.es



TUTORIZACIÓN EN CENTROS ASOCIADOS

En el enlace que aparece a continuación se muestran los centros asociados y extensiones en las que se imparten tutorías de la asignatura. Estas pueden ser:

- **Tutorías de centro o presenciales:** se puede asistir físicamente en un aula o despacho del centro asociado.
- **Tutorías campus/intercampus:** se puede acceder vía internet.

La información ofrecida respecto a las tutorías de una asignatura es orientativa. Las asignaturas con tutorías y los horarios del curso actual estarán disponibles en las fechas de inicio del curso académico. Para más información contacte con su centro asociado.

Consultar horarios de tutorización de la asignatura 61033025

COMPETENCIAS QUE ADQUIERE EL ESTUDIANTE

De entre los *objetivos generales* que persigue el Grado en Química que están reflejados en la memoria aprobada por la ANECA, esta asignatura contribuye a la consecución de los siguientes:

- Inculcar un interés por el aprendizaje de la Química, que permita valorar sus aplicaciones en diferentes contextos e involucrar a los estudiantes en la experiencia intelectualmente estimulante y satisfactoria de aprender y estudiar.
- Proporcionar una base sólida y equilibrada de conocimientos químicos y habilidades prácticas.
- Desarrollar la habilidad para aplicar los conocimientos químicos, teóricos y prácticos, a la solución de problemas en Química.
- Proporcionar una base de conocimientos y habilidades con las que los estudiantes puedan continuar sus estudios en áreas especializadas de Química o áreas multidisciplinares.

Así mismo, esta asignatura contribuye al desarrollo de una parte de las *competencias genéricas* y *específicas* reflejadas en la memoria aprobada por la ANECA para la obtención del título de Graduada o Graduado en Química.

Las *competencias genéricas* que se desarrollan y potencian en esta asignatura son:

- CG1 - Iniciativa y motivación
- CG2 - Planificación y organización
- CG3 - Manejo adecuado del tiempo
- CG4 - Análisis y Síntesis
- CG5 - Aplicación de los conocimientos a la práctica
- CG6 - Razonamiento crítico
- CG7 - Toma de decisiones
- CG8 - Seguimiento, monitorización y evaluación del trabajo propio o de otros
- CG9 - Motivación por la calidad



- CG10 - Comunicación y expresión escrita
- CG13 - Comunicación y expresión matemática, científica y tecnológica
- CG14 - Competencia en el uso de las TIC
- CG15 - Competencia en la búsqueda de información relevante
- CG16 - Competencia en la gestión y organización de la información
- CG17 - Competencia en la recolección de datos, el manejo de bases de datos y su presentación
- CG19 - Compromiso ético (por ejemplo en la realización de trabajos sin plagios, etc.)
- CG20 - Ética profesional

Las *Competencias específicas relativas a conocimientos* son las capacidades que el estudiante adquiere y desarrolla en este curso, y que son propias de la disciplina:

- CE1-C - Conocimiento y comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionadas con las áreas de la Química
- CE2-C - Conocimiento de la terminología química: nomenclatura, términos, convenios y unidades
- CE3-C - Conocimiento de los principios fisicoquímicos fundamentales que rigen la Química y sus relaciones entre áreas de la Química.
- CE8-C - Una base de conocimientos que posibilite continuar los estudios en áreas especializadas de Química o áreas multidisciplinares, y en múltiples dominios de aplicación, tanto tradicionales como nuevos
- CE9-C - Conocimiento y comprensión de los conceptos matemáticos y físicos necesarios para el estudio de la Química

Las *Competencias específicas relativas a habilidades* son:

- CE11-H - Capacidad para aplicar sus conocimientos químicos, teóricos y prácticos, a la resolución de problemas cualitativos y cuantitativos en los ámbitos de la Química
- CE18-H - Habilidad para evaluar, interpretar y sintetizar datos e información química.
- CE20-H - Capacidad para relacionar la Química con otras disciplinas
- CE21-H - Manejo de los modelos abstractos aplicables al estudio de la Química
- CE22-H - Capacidad de aplicar los conocimientos de Matemáticas y Física a la resolución de problemas en el ámbito de la Química

RESULTADOS DE APRENDIZAJE

Los resultados de aprendizaje de la asignatura se pueden resumir en los siguientes puntos:

- Estudiar los mecanismos de interacción entre la radiación y la materia y el resultado de esta interacción.
- Conocer con detalle cada uno de los diferentes tipos de espectros moleculares.
- Estudiar las propiedades y tipos de láseres y establecer los fundamentos de los dispositivos láser y su aplicación en las técnicas espectroscópicas.



- Definir el modelo cinético de los gases y describir las propiedades de transporte de los gases usando conceptos derivados de la teoría cinética de gases.
- Definir los conceptos de energía interna, energía media y energía total y escribir una expresión para la función de partición.
- Establecer la relación entre las funciones termodinámicas y las funciones de partición
- Establecer las fórmulas de las funciones de partición para los modos de movimiento traslacional, rotacional y vibracional y la contribución de la excitación electrónica y su cálculo a partir de datos espectroscópicos.

CONTENIDOS

Primera parte: Espectroscopía Molecular

Tema 1. Introducción a la Espectroscopía

Tema 2. Elementos experimentales en espectroscopía.

Tema 3. Espectroscopía de rotación

Tema 4. Espectroscopía de vibración

Tema 5. Espectroscopía electrónica

Tema 6. Espectroscopías de resonancia magnética

Tema 7. Láseres y espectroscopía láser

Segunda parte: Estadística Molecular

Tema 8. Teoría cinética de gases.



Tema 9. Propiedades de transporte

Tema 10. Termodinámica estadística

Tema 11. Función de partición molecular

Tema 12. Funciones termodinámicas en términos de la función de partición

METODOLOGÍA

Para el desarrollo de las actividades de aprendizaje de la asignatura *Química Física II* el estudiante dispondrá, además de la guía de estudio elaborado por el Equipo Docente y del material didáctico que se le pueda proporcionar en el curso virtual, de los textos básicos recomendados.

La asignatura tiene reconocidos 6 ECTS (150 horas), que se distribuyen según el siguiente esquema:

Preparación y estudio del contenido teórico: 25 %

Desarrollo de actividades prácticas: 15 %

Trabajo autónomo: 60 %

De los Temas en que se desarrolla el programa de la asignatura, que ha sido preparado por el equipo docente y teniendo en cuenta las características peculiares del estudio a distancia, al comienzo del curso, en la plataforma virtual, estarán a disposición de los estudiantes diverso material que ayude al estudio de dichos Temas. Este material incluirá los siguientes elementos:

1. Resumen de conocimientos básicos previos al estudio de cada uno de los Temas.
2. Objetivos específicos de cada Tema.
3. Desarrollo de los contenidos del Tema, dedicando especial atención a las explicaciones de los conceptos básicos de cada uno de los apartados que los componen.
4. Referencias bibliográficas.
5. Actividades, constituidas por cuestiones y problemas de los que se facilitan las soluciones completas.

Se recomienda que los Temas se lean inicialmente de modo que se obtenga una perspectiva de conjunto, identificando los conceptos esenciales, y después se estudien con detalle, recurriendo en caso necesario, a la consulta de los textos indicados en la bibliografía.



SISTEMA DE EVALUACIÓN

TIPO DE PRUEBA PRESENCIAL

Tipo de examen	Examen mixto
Preguntas test	10
Preguntas desarrollo	2
Duración del examen	120 (minutos)
Material permitido en el examen	

Durante el examen solo está permitido el uso de calculadora sin textos. No se pueden usar libros, apuntes ni tablas.

Criterios de evaluación

Cada Prueba Presencial consta de dos partes:

La primera consiste en 10 cuestiones tipo test que pueden tener **una óvarias** respuestas válidas. Se debe señalar las que se consideren correctas y, además, **es necesario justificar brevemente las respuestas elegidas**. Cada cuestión contestada correctamente vale 1 punto.

La segunda parte consiste en la resolución de dos problemas de los tres que se proponen. Se deben explicar los razonamientos e interpretar los resultados que se obtengan. También se valorará la claridad, la forma de expresión y la presentación del examen. Cada problema vale 5 puntos.

La calificación final del examen será la media entre la calificación de las cuestiones y la de los problemas, de forma que cada parte contribuyen al 50%. No obstante, es imprescindible obtener una **calificación mínima de 3 puntos en cada una de las partes** (teoría y problemas) para poder aprobar el examen.

% del examen sobre la nota final	90
Nota del examen para aprobar sin PEC	5,6
Nota máxima que aporta el examen a la calificación final sin PEC	9
Nota mínima en el examen para sumar la PEC	

Comentarios y observaciones

La Prueba presencial se realiza en los Centros Asociados de la UNED, en el día y hora establecidos en el calendario oficial de la UNED que se publicará con antelación suficiente. Para esta asignatura, la convocatoria ordinaria es la de febrero. En caso de no superarla dispondrá también de la convocatoria extraordinaria de septiembre.

PRUEBAS DE EVALUACIÓN CONTINUA (PEC)

¿Hay PEC?	Si
Descripción	



Existen dos PEC que estarán disponibles en el curso virtual de la asignatura. La primera abarca los contenidos de los Temas 1 al 7 y la segunda los de los Temas 8 al 12. La estructura de cada PEC es parecida a la del examen. Tiene dos partes. La primera parte consta de diez preguntas tipo test, que pueden tener una o varias respuestas correctas. Debe señalar las que considere correctas y justificar brevemente su respuesta. La segunda parte consiste en la resolución de dos problemas. Debe desarrollarlos, justificando el procedimiento adoptado y comentando el resultado final.

Criterios de evaluación

Según tiene dispuesto la UNED, la **corrección y calificación** de las PEC es competencia de los **Tutores Intercampus**, quienes las depositarán en la plataforma virtual, una vez corregidas, para que cada estudiante pueda comprobar sus resultados y seguir las indicaciones pertinentes.

La corrección se registrará por los mismos criterios expuestos para las Pruebas Presenciales.

Ponderación de la PEC en la nota final	Cada una de las dos PEC contribuye con un 5% a la calificación final del curso es decir, un 10% en conjunto.
Fecha aproximada de entrega	Debe consultar en el curso virtual los plazos exactos de entrega de las PEC.

Comentarios y observaciones

Se recomienda realizar las PEC tras completar el estudio de los Temas correspondientes. Los principales objetivos que se pretenden con esta actividad por parte del estudiante son los siguientes:

Comprobar si se han adquirido los conocimientos necesarios al estudiar los Temas del programa.

Controlar el progreso de la labor de estudio.

Adquirir un entrenamiento para realizar la Prueba presencial al final del curso.

Las PEC se entregan mediante la aplicación dispuesta en el curso virtual, en formato .doc o compatible, respetando la fecha y hora de entrega límite, ya que el sistema no admite envíos posteriores. Estas fechas de entrega se anunciarán oportunamente en el curso virtual.

OTRAS ACTIVIDADES EVALUABLES

¿Hay otra/s actividad/es evaluable/s? No

Descripción

Criterios de evaluación

Ponderación en la nota final

Fecha aproximada de entrega

Comentarios y observaciones



¿CÓMO SE OBTIENE LA NOTA FINAL?

Tanto para la convocatoria ordinaria (febrero) como para la extraordinaria (septiembre), cada una de las PEC contribuye con un 5% a la calificación final, y el examen presencial supone el restante 90%. De acuerdo con esto la calificación final se obtiene mediante la expresión:

Calificación final = 0,05 PEC1 + 0,05 PEC2 + 0,90 Prueba presencial

La nota final de la asignatura se califica con un máximo de diez puntos, y la calificación de aprobado se obtiene con un mínimo de cinco puntos.

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

ISBN(13):9789500612487

Título:QUÍMICA FÍSICA (8ª edición)

Autor/es:Atkins, Peter; De Paula, Julio ;

Editorial:Editorial Médica Panamericana, Buenos Aires, 2008

Como texto básico que cubre la totalidad del curso se recomienda la siguiente obra:

Atkins, P. y de Paula, J., *Química Física*, 8ª ed., Editorial Médica Panamericana, Buenos Aires (2008)

Este texto está dividido en tres partes: Equilibrio, Estructura y Cambio. Las partes que tiene relación con la asignatura son las de Estructura (capítulos 13-17) y Cambio (capítulo 21)

Los contenidos son bastante completos y se consideran de referencia en todo el mundo. Incluyen explicaciones y desarrollos de gran claridad, figuras en color, tablas, ejemplos resueltos, listados de conceptos clave, lecturas recomendadas, y una selección de preguntas cortas, ejercicios y problemas al final de cada capítulo. También dispone de contenidos accesibles en Internet, tales como presentaciones, datos y gráficos complementarios, y enlaces a otros sitios de interés.

La función que cumple este texto en el estudio de la asignatura es la de aportar materiales detallados que completen el estudio de los Temas que constituyen el programa, que están desarrollados en el curso virtual.

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

ISBN(13):9788436213508

Título:QUÍMICA CUÁNTICA. LA QUÍMICA CUÁNTICA EN 100 PROBLEMAS (1ª)

Autor/es:Bailey Chapman, Lorna Elizabeth ; Troitiño Núñez, Mª Dolores ;

Editorial:U.N.E.D.

ISBN(13):9788448137878



Título:QUÍMICA FÍSICA. VOLUMEN II (5ª Edición)

Autor/es:Levine, Ira N. ;

Editorial:Ariel Ciencia

ISBN(13):9788448198336

Título:PROBLEMAS DE FISICOQUÍMICA

Autor/es:Levine, Ira N. ;

Editorial:: MCGRAW-HILL INTERAMERICANA DE ESPAÑA

ISBN(13):9788478290772

Título:QUÍMICA FÍSICA (2006)

Autor/es:Engel, T. ; Hehre, W. ; Reid, P. ;

Editorial:PEARSON ADDISON-WESLEY

ISBN(13):9788496477483

Título:PROBLEMAS DE QUÍMICA FÍSICA (2006)

Autor/es:Bertrán Rusca J. ; Núñez Delgado J. ;

Editorial:Delta Publicaciones Universitarias

Como bibliografía complementaria se ha seleccionado una representación de textos actuales publicados en español y que pueden enriquecer el estudio de la asignatura.

Bertrán Rusca, J. y Núñez Delgado, J. (coords.), *Química Física I*, Ed. Ariel Ciencia, 2002

Engel, T. y Reid, P., *Química Física*, Ed. Pearson –Addison Wesley, 2006

Levine, I., *Fisicoquímica* (vol. 2), 5ª ed., Ed. McGraw-Hill, Madrid 2004

Del mismo modo, en los libros de problemas encontrará algunos ejercicios de similares características a los que se proponen en este curso.

Levine, I., *Problemas de Fisicoquímica*, Ed. McGraw-Hill, Madrid 2005

Núñez Delgado, J., *Problemas de Química Física*, Ed. Delta Publicaciones, 2007

Algunos de los libros se encuentran disponibles parcialmente en la red a través de Google Books.

La consulta de estas obras no es obligatoria, pero sí se recomienda para adquirir una formación más completa y profundizar en el estudio de la asignatura.

RECURSOS DE APOYO Y WEBGRAFÍA

Los principales medios materiales de apoyo que podrán utilizar los estudiantes de esta asignatura son los siguientes:

Curso virtual

Se desarrolla en la plataforma “aLF” habilitada al efecto en la Web de la UNED. Alberga materiales necesarios para la preparación de la asignatura, tales como los Temas elaborados por el Equipo Docente que constituyen la base del programa y herramientas de comunicación adecuadas para crear foros de discusión de cuestiones de la asignatura, y



mantenerlos activos.

Biblioteca

Tanto la Biblioteca Central como las Bibliotecas de los Centros Asociados de la UNED contienen una buena selección de obras adecuadas para el estudio de la Química Física en general y de esta asignatura en particular, cuya consulta se recomienda a todos los estudiantes.

Enlaces a Internet y medios audiovisuales

En el curso virtual se incluyen enlaces a páginas web que se consideran de interés para el estudio de la asignatura, dedicando especial atención a aquellas que contienen galerías de imágenes y animaciones relativas a modelos atómicos y moleculares, o bien informaciones de tipo institucional o histórico que resultan adecuadas para la adquisición de las competencias previstas. También le recomendamos que vea el video "15 minutos en la vida del electrón" al que puede acceder a través de la página web del CEMAV

IGUALDAD DE GÉNERO

En coherencia con el valor asumido de la igualdad de género, todas las denominaciones que en esta Guía hacen referencia a órganos de gobierno unipersonales, de representación, o miembros de la comunidad universitaria y se efectúan en género masculino, cuando no se hayan sustituido por términos genéricos, se entenderán hechas indistintamente en género femenino o masculino, según el sexo del titular que los desempeñe.

