

QUÍMICA FÍSICA II: ESPECTROSCOPIA Y ESTADÍSTICA MOLECULAR

Curso 2016/2017

(Código:61033025)

1.PRESENTACIÓN DE LA ASIGNATURA

Química Física II: Espectroscopía y Estadística Molecular es la segunda asignatura integrante de la materia de Química Física que 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, además de Teoría cinética; Fenómenos de transporte y Fundamentos de termodinámica estadística.

2.CONTEXTUALIZACIÓN EN EL PLAN DE ESTUDIOS

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 asignatura *Química Física II*, se encuadra como asignatura obligatoria de 6 ECTS en el 3º 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) y, 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 *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:

- Capacidad de análisis y síntesis



- Capacidad de organización y planificación
- Comunicación oral y escrita en lengua nativa
- Iniciativa y motivación
- Conocimientos de informática relativos al ámbito de estudio y capacidad para utilizar las nuevas tecnologías de la información y la comunicación
- Capacidad de gestión de la información
- Resolución de problemas
- Toma de decisiones
- Razonamiento crítico
- Aprendizaje autónomo

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:

- Conocimiento y comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionadas con las áreas de la Química
- Conocimiento de la terminología química: nomenclatura, términos, convenios y unidades.
- Conocimiento de los principios fisicoquímicos fundamentales que rigen la Química y sus relaciones entre las áreas de la Química.
- 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.
- Conocimiento y comprensión de los conceptos matemáticos y físicos necesarios para el estudio de la Química

Las *Competencias específicas relativas a habilidades* son:

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

3. REQUISITOS PREVIOS REQUERIDOS PARA CURSAR LA ASIGNATURA

El plan de estudios del Grado en Química, no marca ningún requisito previo para cursar la asignatura *Química Física II*. No obstante, 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.

Es necesario 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 permitan en caso necesario 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.

4.RESULTADOS DE APRENDIZAJE

Para cumplir los objetivos señalados anteriormente, se pretende que los estudiantes adquieran y desarrollen la serie de competencias específicas y genéricas enumeradas en el apartado anterior, que constituirán el resultado de su aprendizaje.

5.CONTENIDOS DE LA ASIGNATURA

La asignatura *Química Física II* está dedicada al estudio de los siguientes temas: 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.

El programa en el que se desarrollan estos contenidos está organizado en 2 Partes: Espectroscopía (7 Temas) y Estadística Molecular (5 temas) que se describen a continuación:

Primera parte: Espectroscopía

Tema 1.- Introducción a la Espectroscopía: luz y materia

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

Se comienza, en el Tema 1, exponiendo los fundamentos básicos de la Espectroscopía, la naturaleza de la luz y el espectro electromagnético, la interacción de la radiación con la materia y el mecanismo y resultado de la interacción: espectro (tipos y clasificación, espectros de radiación de dipolo, espectros Raman), para continuar, en el Tema 2, abordando el estudio de los elementos experimentales.

Los Temas 3, 4 y 5 tratan de las espectroscopías de rotación y vibración (con el tratamiento clásico y mecano-cuántico de las vibraciones moleculares), espectroscopía electrónica de moléculas diatómicas y poliatómicas, sus aplicaciones y los detalles de los espectros.

El Tema 6 abarca las espectroscopías de resonancia magnética nuclear, su origen, los efectos del campo magnético, principios básicos y sus aplicaciones. Y, finalmente, en el Tema 7 se tratan los principios básicos de tipos y propiedades de láseres y su uso en espectroscopía..

Segunda parte: Estadística Molecular

Tema 8. Teoría cinética de gases



Tema 9. Propiedades de transporte

En el Tema 8 se trata la teoría cinética del movimiento y la presión de un gas, distribución de velocidades de las moléculas y distribución de energías y teoría de colisiones.

El Tema 9 abarca el estudio de las propiedades de transporte en gases, propiedades de transporte y la difusión en líquidos; Leyes de Fick, Relación de Stokes-Einstein; ecuación de difusión y fluidos newtonianos y no newtonianos, viscosidad estructural, plasticidad y dilatación; la conductividad iónica y Leyes de Kohlrausch, Índices de transporte, Teoría de Arrhenius y Teoría de Debye-Hückel-Onsager.

Tema 10. Termodinámica estadística

Tema 11. Función de partición molecular

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

El Tema 10 abarca los Conceptos fundamentales de la Termodinámica Estadística, estados del sistema; sistemas de partículas discernibles: Estadística de Maxwell-Boltzmann; sistemas de partículas indiscernibles: Estadística de Bose-Einstein y Estadística de Fermi-Dirac.

A continuación, en el Tema 11 se trata la Función de partición molecular: función de partición nuclear y función de partición electrónica: Átomos, moléculas biatómicas, moléculas poliatómicas; funciones de partición traslacional, vibracional y rotacional.

Se finaliza con el Tema 12, donde se aborda el estudio de funciones termodinámicas en términos de la función de partición: ecuaciones de estado, energía y calor específico, entalpía, entropía: traslacional, electrónico, vibracional y rotacional; energía de Gibbs; constantes de equilibrio; sistemas de partículas dependientes; definición del colectivo canónico.

Estudio de los contenidos teóricos del programa.

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.

6.EQUIPO DOCENTE

- [MARIA DOLORES TROITIÑO NUÑEZ](#)
- [CARMEN SANCHEZ RENAMAYOR](#)

7.METODOLOGÍA Y ACTIVIDADES DE APRENDIZAJE



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 %

8.EVALUACIÓN

La calificación final de esta asignatura se realizará por evaluación continuada teniendo en cuenta las calificaciones que obtenga el estudiante en cada una de los apartados siguientes:

Realización de actividades de aprendizaje.

Después de adquirir un conocimiento suficientemente completo de cada Tema, es muy conveniente realizar una autoevaluación mediante los ejercicios y propuestas prácticas incluidas para cada Tema, de los que pueden consultarse las soluciones.

Pruebas de Evaluación Continua (PEC)

La asignatura contará con dos Pruebas de Evaluación Continua que el estudiante intentará resolver, con el fin de evaluar los conocimientos adquiridos. Las PEC deben ser entregadas, a través de la plataforma virtual, mediante la herramienta "Tareas" y en formato .doc con el fin de facilitar la corrección. Tenga en cuenta que debe respetarse la fecha y hora de entrega límite ya que el sistema no aceptará que se envíen con posterioridad. Se valorará que las respuestas estén elaboradas de modo personal evitando la memorización y la repetición textual de los materiales didácticos.

El tutor devolverá las PEC corregidas para ayudar al estudiante en el estudio de la asignatura.

Prueba presencial

Habrà una Prueba Presencial en la convocatoria de Febrero y otra convocatoria extraordinaria en Septiembre. El examen tendrá una duración de dos horas y se celebrará a la hora y días señalados en el calendario de Pruebas Presenciales elaborado por la UNED.

El examen presencial consta de dos partes. La primera se compone de diez cuestiones con formato de respuesta múltiple, aunque no es una prueba objetiva ya que deberá justificar brevemente la respuesta, o respuestas, que se consideren correctas. La segunda parte se compone de dos problemas. Ambas partes contribuyen con el 50% a la calificación final del examen presencial. Será requisito imprescindible para poder aprobar el examen obtener una calificación mínima de tres puntos en cada una de las partes (teoría y problemas). Se valorará que las respuestas estén elaboradas de modo personal evitando la memorización y la repetición textual de los materiales didácticos.

Calificación final:

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:

$$\text{Calificación} = 0,05\text{PEC1} + 0,05\text{PEC2} + 0,90\text{Examen}$$

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.



9.BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

ISBN(13): 9789500612487
Título: QUÍMICA FÍSICA (8ª edición)
Autor/es: Atkins, Peter; De Paula, Julio ;
Editorial: Editorial Médica Panamericana, Buenos Aires, 2008

Buscarlo en Editorial UNED

Buscarlo en librería virtual UNED

Buscarlo en bibliotecas UNED

Buscarlo en la Biblioteca de Educación

Comentarios y anexos:

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.

10.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: UNED

Buscarlo en librería virtual UNED

Buscarlo en bibliotecas UNED

Buscarlo en la Biblioteca de Educación

Buscarlo en Catálogo del Patrimonio Bibliográfico

ISBN(13): 9788448137878
Título: QUÍMICA FÍSICA. VOLUMEN II (5ª Edición)
Autor/es: Levine, Ira N. ;
Editorial: Ariel Ciencia

Buscarlo en librería virtual UNED

Buscarlo en bibliotecas UNED



Buscarlo en la Biblioteca de Educación

Buscarlo en Catálogo del Patrimonio Bibliográfico

ISBN(13): 9788448198336

Título: PROBLEMAS DE FISICOQUÍMICA

Autor/es: Levine, Ira N. ;

Editorial: : MCGRAW-HILL INTERAMERICANA DE ESPAÑA

Buscarlo en librería virtual UNED

Buscarlo en bibliotecas UNED

Buscarlo en la Biblioteca de Educación

Buscarlo en Catálogo del Patrimonio Bibliográfico

ISBN(13): 9788478290772

Título: QUÍMICA FÍSICA (2006)

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

Editorial: PEARSON ADDISON-WESLEY

Buscarlo en librería virtual UNED

Buscarlo en bibliotecas UNED

Buscarlo en la Biblioteca de Educación

Buscarlo en Catálogo del Patrimonio Bibliográfico

ISBN(13): 9788496477483

Título: PROBLEMAS DE QUÍMICA FÍSICA (2006)

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

Editorial: Delta Publicaciones Universitarias

Buscarlo en librería virtual UNED

Buscarlo en bibliotecas UNED

Buscarlo en la Biblioteca de Educación

Buscarlo en Catálogo del Patrimonio Bibliográfico

Comentarios y anexos:

Como bibliografía complementaria se ha seleccionado una representación de textos actuales publicados en español y que pueden enriquecer el estudio de la asignatura. Del mismo modo, en los libros de problemas encontrará algunos ejercicios de similares características a los que se proponen en este curso. 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.

11. RECURSOS DE APOYO

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

Curso virtual

Se desarrollará en la plataforma "aLF" habilitada al efecto en la Web de la UNED. Albergará 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

En el curso virtual se tiene previsto incluir enlaces de Internet que se consideren de interés para el estudio de la asignatura, dedicando especial atención a aquellos que contengan galerías de imágenes y animaciones relativas a modelos atómicos y moleculares, o bien informaciones de tipo institucional o histórico que resulten adecuadas para la adquisición de las competencias previstas.

Medios audiovisuales

Dentro del curso virtual encontrará programas de radio relacionados con la asignatura. 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

12. TUTORIZACIÓN

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 Fisicoquímicas
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 Sanchez Renamayor

Despacho 341
Tel.: 91 398 73 86
Horario de Guardia: Miércoles de 16 a 18 horas
Correo electrónico: csanchez@ccia.uned.es

M^a Dolores Troitiño Nuñez

Despacho 306
Tel.: 91 398 73 88
Horario de Guardia: Jueves de 15 a 19 horas
Correo electrónico: mtroitino@ccia.uned.es

Ámbito: GUI - 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/>



F76305FB642610F22FA4ADD48343141D