



Universidad
de Alcalá

GUÍA DOCENTE

QUÍMICA FÍSICA MOLECULAR (660011)

Grado en Química
Universidad de Alcalá

Curso Académico 2022/2023
2º Curso – 2º Cuatrimestre

GUÍA DOCENTE

Nombre de la asignatura:	QUÍMICA FÍSICA MOLECULAR
Código:	660011
Titulación en la que se imparte:	GRADO EN QUÍMICA
Departamento y Área de Conocimiento:	QUÍMICA ANALÍTICA, QUÍMICA FÍSICA E INGENIERIA QUÍMICA (QUÍMICA FÍSICA)
Carácter:	OBLIGATORIA
Créditos ECTS:	6 teóricos
Curso y cuatrimestre:	2º Curso, 2º Cuatrimestre
Profesorado:	Dr. Luis Manuel Frutos Gaité (Coordinador) Dr. Francisco Mendicuti Madrid
Horario de Tutoría:	A concertar con el profesor
Idioma en el que se imparte:	Español

1. PRESENTACIÓN

La Química Física Molecular es una asignatura obligatoria de 6 créditos ECTS correspondiente a 2º curso del Grado en Química, a impartir en el segundo cuatrimestre del curso académico. Comprende tres bloques diferenciados en cuanto a su contenido: Fundamentos de Química Cuántica, Termodinámica Estadística y Espectroscopia Molecular. La asignatura va a familiarizar al alumno con los aspectos denominados “microscópicos o estructurales” del área de conocimiento de Química Física. Para ello se introduce al alumno en la descripción a nivel microscópico, molecular o estructural de los sistemas químicos y las propiedades moleculares de la materia, mediante el estudio de los fundamentos de la Química Cuántica, la Termodinámica Estadística y la Espectroscopia. Se estudian los Principios Fundamentales de la Mecánica Cuántica, y se aplican a sistemas sencillos para luego abordar el estudio de la estructura de los átomos, comenzando el átomo de hidrógeno y posteriormente átomos polielectrónicos. A continuación, siguiendo el proceso de síntesis marcado se llega al problema de cómo se combinan los átomos, estudiando las moléculas diatómicas y poliatómicas. Posteriormente se estudian los fundamentos de la Termodinámica Estadística cuyo fin es predecir propiedades termodinámicas macroscópicas de los sistemas químicos a partir del conocimiento estructural de los mismos. En el último bloque, se tratan los métodos espectroscópicos de caracterización molecular que se apoyan en la Mecánica Cuántica.

El curso permitirá al alumno explicar y entender de manera más rigurosa nociones, conceptos y descripciones que vieron, de manera más cualitativa, en asignaturas como Enlace Químico y Estructura de la Materia y Química Básica del primer curso del Grado o en Termodinámica Química de 2º curso, pero también le preparará para un conocimiento más profundo de aspectos más avanzados de la Química Física y

algunas de sus aplicaciones, la ciencia de materiales, polímeros, reactividad química, etc., base de otras asignaturas del Grado en Química.

Prerrequisitos y Recomendaciones (si es pertinente)

Se recomienda al alumno haber superado las asignaturas de Química Básica y Enlace Químico y Estructura de la Materia del primer curso del Grado en Química. Es recomendable también que haya superado la Física del primer curso, y que tenga un conocimiento sólido del cálculo diferencial e integral adquirido al superar la asignatura de Matemáticas también del primer curso del Grado en Química. Igualmente se recomienda haber cursado Termodinámica Química del primer cuatrimestre del segundo curso.

2. COMPETENCIAS

El alumno debería desarrollar una serie de competencias, tanto generales como específicas de acuerdo con la metodología y contenido de la asignatura:

Competencias genéricas:

1. Capacidad para entender la descripción de la materia mediante leyes físicas con un planteamiento matemático.
2. Capacidad de búsqueda de información y su discusión crítica en base a la bibliografía proporcionada.
3. Capacidad para plantear problemas de manera crítica adaptando el planteamiento al objetivo del problema.
4. Capacidad para manejar ecuaciones matemáticas en la resolución cuantitativa de problemas químicos.
5. Desarrollo de la capacidad de trabajo en equipo y de exposición pública de trabajos y conocimientos y defensa crítica de los mismos.

Competencias específicas:

1. Capacidad para aplicar las leyes de la mecánica cuántica a la descripción de átomos y moléculas.
2. Capacidad para analizar la naturaleza física del enlace químico aplicando la mecánica cuántica y predecir propiedades moleculares básicas.
3. Adquirir una visión general del comportamiento espectroscópico de átomos y moléculas que permita al alumno discriminar qué técnicas se adecuan a cada problema químico, cuáles son sus límites de aplicabilidad y qué información puede obtenerse de cada una de ellas.
4. Capacidad para establecer mediante la aplicación de los principios de la termodinámica estadística un nexo entre la descripción macroscópica y la microscópica de los sistemas químicos.

3. CONTENIDOS

Tema 1.- Dualidad onda-corpúsculo. Principio de incertidumbre de Heisenberg. Ecuación de ondas: Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. Postulados de la Mecánica Cuántica. Operadores en la mecánica cuántica: construcción y propiedades. Propiedades e interpretación de la función de onda.

Tema 2.- Partícula libre en una dimensión. Partícula en una caja monodimensional. Funciones de onda estacionarias. Partícula en una caja tridimensional: Factorización de las funciones de onda. Oscilador armónico.

Tema 3.- Momento Angular. Rotor rígido. Átomo de hidrógeno. Espectro del átomo de hidrógeno.

Tema 4.- Métodos aproximados de resolución de la ecuación de Schrödinger. Principio Variacional. Teoría de Perturbaciones.

Tema 5.- Átomos polielectrónicos. El espín electrónico. Simetría de la función de onda. Principio de exclusión de Pauli. Orbitales de Slater. Método del campo autoconsistente de Hartree-Fock. Funciones de onda espacial y de espín.

Tema 6.- El Enlace Químico. Moléculas Diatómicas. Aproximación de Born-Oppenheimer. Método de Orbitales Moleculares. Método de Enlace de Valencia. Introducción a moléculas poliatómicas. Aproximación pi-electrónica: Método de Hückel. Propiedades electrónicas de moléculas conjugadas.

Tema 7.- El método estadístico. Distribución de Boltzmann. La función de partición. Funciones termodinámicas en términos de las funciones de partición. Aplicaciones de la Termodinámica Estadística.

Tema 8.- Métodos Espectroscópicos. Características de la radiación electromagnética. Interacción de la radiación electromagnética y la materia. Procesos de absorción y emisión: Coeficientes de Einstein. Intensidad de las líneas espectrales: Reglas de Selección. Anchura de las líneas espectrales.

Tema 9.- Espectros de rotación. Rotor rígido. Moléculas diatómicas y poliatómicas lineales: Niveles de energía, Intensidad de bandas, sustitución isotópica. Efecto Stark. Distorsión centrífuga. Moléculas poliatómicas no lineales. Aplicaciones.

Tema 10.- Espectros de vibración-rotación. Oscilador armónico. Moléculas diatómicas: Anarmonicidad. Energías de disociación. Estructura fina de rotación. Sustitución isotópica. Moléculas poliatómicas: Modos normales de vibración. Moléculas lineales y no lineales. Frecuencias de grupo. Aplicaciones.

Tema 11.- Espectros Raman. Difusión de luz. Efecto Raman. Interacción dipolo-inducido. Polarizabilidad. Dispersión Raman rotacional: Moléculas diatómicas y poliatómicas lineales. Moléculas poliatómicas no lineales. Dispersión Raman de

vibración: Moléculas diatómicas. Moléculas poliatómicas. Polarización de las líneas Raman. Aplicaciones.

Tema 12.- Espectros Electrónicos. Niveles electrónicos moleculares. Estructura vibracional: Principio de Franck-Condon, intensidad de transiciones y reglas de selección en moléculas diatómicas. Disociación y predisiociación. Estructura fina de rotación. Fluorescencia y Fosforescencia. Moléculas poliatómicas: Tipos de transiciones. Cromóforos. Espectroscopia fotoelectrónica. Aplicaciones.

Bloques de contenido (se pueden especificar los temas si se considera necesario)	Total de clases, créditos u horas
Fundamentos de Química Cuántica y su Aplicación	<ul style="list-style-type: none"> • Créditos ECTS Totales: 3 • Clases teóricas: 16 horas • Seminarios Grupales: 8 horas
Fundamentos de Termodinámica Estadística	<ul style="list-style-type: none"> • Créditos ECTS Totales: 0,5 • Clases teóricas: 3 horas • Seminarios Grupales: 1,0 horas
Espectroscopia Molecular	<ul style="list-style-type: none"> • Créditos ECTS Totales: 2,5 • Clases teóricas: 13 horas • Seminarios Grupales: 7 horas

4. METODOLOGÍAS DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE.-ACTIVIDADES FORMATIVAS

4.1. Distribución de créditos (especificar en horas)

Número de horas presenciales:51	Clases teóricas y seminarios: 48h Tutorías ECTS: 3h
Número de horas del trabajo	Estudio autónomo: estudio independiente,

propio del estudiante: 99	elaboración trabajos, actividades dirigidas, ejercicios
Total horas	150

4.2. Estrategias metodológicas, materiales y recursos didácticos

Clases Teóricas	<ul style="list-style-type: none"> • Se impartirán 32 horas de clases teóricas magistrales a grupos completos para introducir y desarrollar los conceptos fundamentales que abarca el programa. Estas clases estarán orientadas a explicar los contenidos básicos de la asignatura. • Estas clases también se emplearán para orientar a los alumnos en la tarea de ampliar y profundizar en los contenidos de los diferentes temas, indicándoles los aspectos más interesantes y relevantes del programa sobre los que deben incidir. Se les podrá encomendar tareas, como preparación de algún trabajo expositivo individual o en grupo sobre esos aspectos que serán evaluados en las tutorías personalizadas regladas o seminarios grupales. • En cuanto a los materiales y recursos didácticos, las clases presenciales teóricas se llevarán a cabo fundamentalmente clarificando los conceptos explicados en la pizarra y con la ayuda de material audiovisual (presentaciones animadas, gráficas,...) para la comprensión de los conceptos y metodologías específicas de la asignatura.
Seminarios Grupales	<ul style="list-style-type: none"> • En estos seminarios de grupo (16 horas) que se impartirá grupos completos, se discutirán los ejercicios prácticos como aplicación de la teoría expuesta en las clases teóricas. • El alumno dispondrá de los ejercicios que se realizarán, con suficiente

	<p>antelación para que pueda trabajarlos antes del seminario grupal. El alumno deberá participar de manera activa en la resolución de esos ejercicios.</p> <ul style="list-style-type: none">• Uno de los objetivos de este tipo de seminarios es el fomentar los hábitos de trabajo individual y continuo del alumno a lo largo del curso, a la vez que aumentar la capacidad de exposición pública de sus resultados y de crítica y autocrítica.• Los seminarios necesitarán materiales y recursos didácticos similares al de las clases teóricas, con explicaciones y aclaraciones en la pizarra tanto por parte del profesor como del alumno.
Tutorías Personalizadas Regladas	<ul style="list-style-type: none">• Con un máximo de 3 horas/curso por alumno y en grupos más pequeños de trabajo (cada grupo se dividirá en subgrupos) se utilizarán para profundizar en la comprensión de la materia y reforzar y afianzar individualmente los conocimientos adquiridos. También servirán para resolver posibles dudas del alumno.• Con este tipo de tutorías se tratará de promover el trabajo en equipo, las habilidades de búsqueda y selección de información bibliográfica, así como de preparación de informes. También favorecerán la interacción entre los componentes del grupo y el profesor, fomentando la crítica y autocrítica, y además permitirán mejorar la capacidad de exposición pública de los alumnos.• Las tutorías personalizadas se basarán principalmente en la discusión individual con el alumno, por lo que no se requerirá en principio ningún material o recurso específico mas allá de los habituales (pizarra, papel,...). Asimismo, una parte de estas tutorías se podrá realizar usando la plataforma de Aula Virtual.

5. EVALUACIÓN: Procedimientos, criterios de evaluación y de calificación

Criterios de evaluación

En el proceso de aprendizaje del alumno, se valorarán fundamentalmente los siguientes aspectos:

- Posesión y comprensión de conocimientos adquiridos, así como la capacidad de aplicación de los mismos a la resolución de problemas y la interpretación de los resultados obtenidos.
- Capacidad de observación, razonamiento crítico y comunicación de los conocimientos adquiridos.
- Cumplimiento de las obligaciones, como asistencia a los seminarios grupales y tutorías regladas, realización de los ejercicios y trabajos encomendados individuales o en grupo, exposición de esos trabajos, interés demostrado, iniciativa, etc.

Criterios de calificación

- Alumnos que participen de la evaluación continua: Se realizarán dos pruebas escritas, con un peso del 40% cada una. Adicionalmente, se realizarán aproximadamente siete pruebas breves tipo test durante clases de seminarios, que junto con todas aquellas tareas propuestas en las clases de seminario y tutorías personalizadas tendrán un peso del 20%.
- Alumnos que no participen en la evaluación continua se les realizará en una única prueba en la que se evaluarán la adquisición de las capacidades y competencias, así como los conocimientos expuestos en esta guía.
- La convocatoria extraordinaria consistirá en una única prueba escrita donde el alumno se examinará de los contenidos no superados en la convocatoria ordinaria.

Con estos criterios, según el R.D 1125/2003 que regula el Suplemento al Título se adoptará la siguiente escala de calificaciones:

- Matrícula de honor (9,0-10): excelencia limitada al 5% del alumnado.
- Sobresaliente (9,0-10)
- Notable (7,0-8,9)
- Aprobado (5,0-6,9)
- Suspenso (0,0-4,9)

Procedimientos de evaluación

- Los alumnos que por motivos excepcionales no participen en la evaluación continua deberán solicitarlo por escrito al Decano en las dos primeras semanas de impartición de la asignatura explicando las razones que le impiden seguir el sistema de evaluación continua. En caso de aceptarse tal petición, el alumno será examinado en una única prueba que evaluará las capacidades y competencias descritas en esta guía.
- Se efectuarán hasta un máximo de cuatro pruebas escritas a lo largo del curso. La duración de estas pruebas será de un máximo de 3 horas.
- Evaluación continua, en las clases de seminarios grupales y tutorías personalizadas regladas mediante tareas propuestas y pruebas cortas con carácter periódico si fuese necesario. Asimismo se utilizará en los casos que convenga la plataforma de Aula Virtual como soporte para el trabajo individual del alumno.

6. BIBLIOGRAFÍA

Bibliografía Básica

1. I.N. Levine, Química Cuántica, Ed. 5ª, Prentice Hall, 2001.
2. D.A. McQuarrie, J.D. Simon, Physical Chemistry. A Molecular Approach, University Science Books, 1997.
3. Requena, J. Zuñiga, Espectroscopia Atómica y Molecular, Prentice Hall, 2003.
4. P. Atkins, J. de Paula, Química Física, Ed. 8ª, Panamericana, 2006.
5. J.M. Pérez-Martínez, A.L. Esteban, M.P. Galache, Problemas resueltos de Química Cuántica y Espectroscopia Molecular, Publicaciones Univ. de Alicante, Alicante, 2001.

Bibliografía Complementaria (optativo)

6. J. Bertrán, V. Branchadell, M. Moreno, M. Sodupe, *Química Cuántica*, Síntesis, 2000.
7. C.N. Banwell, E.M. McCash, Fundamentals of Molecular Spectroscopy, 4th Ed. McGraw-Hill, London, 1997.
8. D.A. McQuarrie, Statistical Mechanics, University Science Books, 2000.
9. D.A. McQuarrie, Student Solutions Manual for Physical Chemistry, University Science ,1998.

La Universidad de Alcalá garantiza a sus estudiantes que, si por exigencias sanitarias las autoridades competentes impidieran la presencialidad total o parcial de la actividad docente, los planes docentes alcanzarían sus objetivos a través de una metodología de enseñanza-aprendizaje y evaluación en formato online, que retornaría a la modalidad presencial en cuanto cesaran dichos impedimentos.