FICHA IDENTIFICATIVA

DATOS DE LA ASIGNATURA

Código: 36451
Nombre: Química Física II
Ciclo: Grado
Créditos ECTS: 6
Curso académico: 2025-26

TITULACIONES

Titulación	Centro	Curso	Periodo
1110 - Grado en Química	Facultat de Química	3	Primer cuatrimestre
1934 - Doble Grado en Química e Ingeniería Química	Facultat de Química	3	Primer cuatrimestre

MATERIAS

Titulación	Materia	Carácter
1110 - Grado en Química	Química Física	OBLIGATORIA
1934 - Doble Grado en Química e Ingeniería Química	Tercer curso	OBLIGATORIA

COORDINACIÓN

GIMENEZ ROMERO DAVID

RESUMEN

Con la asignatura de ***Química Física II*** se pretende, esencialmente, que el alumno adquiera conocimientos básicos de dos partes fundamentales de la Química-Física, como son la Química Cuántica y la Espectroscopia. La Química Cuántica consiste en la aplicación de la Física Cuántica al estudio de la estructura atómica y molecular. La Espectroscopia se puede definir como el estudio de la interacción de la radiación electromagnética con la materia y utiliza principalmente conocimientos de Química Cuántica. Ambas materias son cada vez más interdisciplinares, ya que se usan comúnmente en otras ramas de la Química.

Por lo tanto, con esta asignatura se establecerán las bases necesarias para que el estudiante pueda abordar posteriormente con éxito el estudio de diferentes partes de la Química y de la propia Química Física, que utilizan habitualmente los conceptos de Química Cuántica y Espectroscopia.

de Química Cuántica y Espectroscopia.

CONOCIMIENTOS PREVIOS

RELACIÓN CON OTRAS ASIGNATURAS DE LA MISMA TITULACIÓN

No se han especificado restricciones de matrícula con otras asignaturas del plan de estudios.

OTROS TIPOS DE REQUISITOS

Esta asignatura no tiene restricciones de matrícula con ninguna otra de la titulación. En todo caso, a fin de poder abordar con éxito la asignatura, son imprescindibles conocimientos básicos previos, del nivel exigido en el primer curso del Grado en Química, en:

- Mecánica y Electromagnetismo (Física I y II).
- Estructura atómica i molecular (Química I).
- Matemáticas: logaritmos, exponenciales, números complejos, derivadas e integrales sencillas, ecuaciones diferenciales ordinarias y fundamentos de estadística.

COMPETENCIAS / RESULTADOS DE APRENDIZAJE

1110 - Grado en Química

Actuar con autonomía en el aprendizaje, tomando decisiones fundamentadas en diferentes contextos, emitiendo juicios en base a la experimentación y el análisis y transfiriendo el conocimiento a nuevas situaciones.

Al final de la materia el estudiante/la estudiante demostrará capacidad de análisis, síntesis y razonamiento crítico.

Al final de la materia el estudiante/la estudiante demostrará capacidad inductiva y deductiva.

Al final de la materia el estudiante/la estudiante distinguirá los aspectos cualitativos y cuantitativos de los problemas químicos.

Al final de la materia el estudiante/la estudiante enumerará los principios de la Mecánica Cuántica y los aplicará a la descripción de la estructura y propiedades de átomos y moléculas.

Al final de la materia el estudiante/la estudiante enunciará los principios de termodinámica y cinética y su aplicación en Química.

Al final de la materia el estudiante/la estudiante identificará los procesos químicos en la vida diaria.

Al final de la materia el estudiante/la estudiante identificará los tipos principales de reacción química y sus principales características asociadas.

Al final de la materia el estudiante/la estudiante interpretará la relación de la variación de las propiedades características de los elementos químicos con la Tabla Periódica.

Al final de la materia el estudiante/la estudiante podrá describir las características y comportamiento de los diferentes estados de la materia y las teorías empleadas para explicarlos.

Al final de la materia el estudiante/la estudiante podrá implementar metodologías sostenibles y

respetuosas con el medio ambiente.

Al final de la materia el estudiante/la estudiante relacionará la Química con otras disciplinas.

Al final de la materia el estudiante/la estudiante relacionará teoría y experimentación.

Al final de la materia el estudiante/la estudiante resolverá problemas de forma efectiva.

Al final de la materia el estudiante/la estudiante utilizará correctamente la terminología química, nomenclatura, convenios y unidades.

Al final de la materia el estudiante abordará nuevos problemas y planteará estrategias para solucionarlos.

Colaborar eficazmente en equipos de trabajo, asumiendo responsabilidades y funciones de liderazgo y contribuyendo a la mejora y desarrollo colectivo.

Conocer y comprender, desde el propio ámbito de la titulación, las desigualdades por razón de sexo y género en la sociedad; integrar las diferentes necesidades y preferencias por razón de sexo y de género en el diseño de soluciones y resolución de problemas.

Contribuir en el diseño, desarrollo y ejecución de soluciones que den respuesta a demandas sociales, teniendo en cuenta como referente los Objetivos de Desarrollo Sostenible.

Demostrar razonamiento crítico y autocrítico en el ámbito de la titulación, considerando aspectos tales como la ética profesional, los valores morales y las implicaciones sociales de las diferentes actividades realizadas

Expresarse correctamente, tanto en forma oral como escrita, en cualquiera de las lenguas oficiales de la comunidad valenciana

Proponer soluciones creativas e innovadoras a situaciones o problemas complejos, propios del ámbito de conocimiento, para dar respuesta a las diversas necesidades profesionales y sociales.

Saber comunicarse de manera efectiva, tanto de forma oral como escrita, adaptándose a las características de la situación y de la audiencia.

DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS

1. Conceptos básicos. Principios de la Mecánica Cuántica

Desarrollo de la teoría cuántica. Dualidad onda-corpúsculo. Ecuación de Schrödinger. Formalismo matemático. Postulados de la Mecánica Cuántica. Estados estacionarios. Principio de incertidumbre.

Movimiento de traslación: partícula en un recinto unidimensional. Partícula en un recinto bidimensional. Técnica de separación de variables. Barreras finitas y efecto túnel. Movimiento vibracional: Oscilador

2. Sistemas modelo

armónico.

3. Átomo de hidrógeno

Introducción. Momento angular orbital. Rotor rígido. Átomo de Hidrógeno: planteamiento de la solución formal de la ecuación de Schrödinger. Energías y funciones de los estados ligados. Momento angular de espín.

4. Átomos poliectrónicos

Átomos poliectrónicos: planteamiento general. Métodos aproximados. Átomo de Helio. Aproximación orbital. Principio de antisimetría. Orbitales autoconsistentes (SCF). Estados electrónicos.

5. Estructura molecular

Moléculas polielectrónicas: planteamiento general. Aproximación de Born-Oppenheimer. La molécula ión de hidrógeno (método OM-CLOA). La molécula de hidrógeno. Moléculas diatómicas. Moléculas poliatómicas. Sistemas pi-electrónicos. Método de Hückel.

6. Fundamentos de Espectroscopia

La radiación electromagnética. Espectroscopia: tipos de espectros. Interacción radiación materia: aproximación semiclásica. Ley de distribución de Boltzmann. La señal espectroscópica: posición, intensidad y anchura. Intensidad de una señal espectroscópica. Ley de Lambert-Beer. Emisión láser

7. Espectroscopias de Rotación y Vibración

Espectroscopias de movimiento nuclear colectivo. Niveles de energía rotacional de moléculas diatómicas y lineales. Espectros de rotación pura. Espectroscopia de microondas. Niveles de energía vibracional. Espectros de vibración de moléculas diatómicas. Espectros de rotación-vibración. Espectros de vibración de moléculas poliatómicas: modos normales de vibración. Espectroscopia IR. Espectroscopia Raman.

8. Espectroscopia Electrónica

Interpretación cuántica de los espectros electrónicos: moléculas diatómicas. Estructura vibracional: principio de Franck-Condon. Reglas de selección. Espectroscopia electrónica de moléculas poliatómicas. Fluorescencia y fosforescencia.

VOLUMEN DE TRABAJO (HORAS)

ACTIVIDADES PRESENCIALES

Actividad	Horas
Tutorías	9,00
Teoría	51,00
Total horas	**60,00**

ACTIVIDADES NO PRESENCIALES

Actividad	Horas
Asistencia a otras actividades	0,00
Elaboración de trabajos individuales o en grupo	0,00
Estudio y trabajo autónomo	90,00
Preparación de clases	0,00
Preparación de actividades de evaluación	0,00
Resolución de casos prácticos	0,00
Total horas	**90,00**

METODOLOGÍA DOCENTE

El desarrollo de la asignatura se estructura en torno a los siguientes ejes:

- las clases teóricas
- las tutorías grupales

Por lo que respecta a las primeras, en ellas se ofrecerá una visión global del tema tratado y se incidirá en aquellos conceptos clave necesarios para su comprensión. Asimismo, se indicarán los recursos más recomendables para la preparación posterior del tema en profundidad.

Las tutorías se dedicarán al planteamiento y resolución de problemas y cuestiones, las cuales permitirán identificar los elementos y conceptos esenciales de cada tema. Para estas sesiones, se proporcionará una lista de cuestiones y problemas que servirá para reforzar los conocimientos y ejercitarse en cada uno de los aspectos tratados. El alumno/a deberá entregar resueltos los problemas y cuestiones que el Profesor indique.

nes que el Profesor indique.

EVALUACIÓN

Se utilizarán los siguientes sistemas de evaluación:

- Pruebas consistentes en Exámenes Escritos, Orales y/o Prácticos.
    - Evaluación de las sesiones de tutorías grupales, seminarios, elaboración de trabajos y/o

exposiciones orales.
- Evaluación continua de cada alumno basada en las actividades presenciales, participación y grado de implicación en el proceso de enseñanza-aprendizaje.

La evaluación del aprendizaje de los estudiantes tendrá en cuenta todos los aspectos expuestos en el apartado de metodología de esta guía docente.

Modalidad A

PRIMERA CONVOCATORIA

La calificación final constará de:

El examen (75%), que consistirá en una serie de cuestiones teóricas y problemas numéricos, los cuales tratarán sobre los conceptos básicos impartidos en clase. El examen será el mismo para todos los grupos.

Evaluación continua (25%), que contempla pruebas de evaluación realizadas a lo largo del curso en forma de tests de respuesta múltiple o breve, la evaluación de las sesiones de tutorías grupales, mediante la realización y/o entrega de ejercicios y cuestiones, y la evaluación continua de cada alumno basada en la participación y grado de implicación en el proceso de enseñanza-aprendizaje. **Únicamente en casos excepcionales y en el plazo establecido por los profesores, se podrá renunciar a esta modalidad A.**

La calificación mínima del examen escrito deberá ser igual o superior a 4,5 sobre 10 para poder promediar con la nota de la evaluación continua. La calificación global mínima para aprobar la asignatura es 5,0 sobre 10.

SEGUNDA CONVOCATORIA

En la segunda convocatoria los estudiantes realizarán un examen consistente en una serie de cuestiones teóricas y problemas numéricos, los cuales tratarán sobre los conceptos básicos impartidos en clase. El examen será el mismo para todos los grupos. La calificación final, incluyendo la evaluación continua, se realizará utilizando la misma ponderación que en la primera convocatoria. La calificación global mínima para aprobar la asignatura es 5,0 sobre 10.

Modalidad B

Esta modalidad únicamente se aceptará en aquellos casos muy excepcionales en los que el profesor haya aceptado la solicitud del estudiante.

PRIMERA Y SEGUNDA CONVOCATORIA

La calificación final constará del examen (90%) y de las actividades de evaluación continua (10%).

La calificación mínima del examen escrito deberá ser igual o superior a 4,5 sobre 10 para poder promediar con la nota de la evaluación continua. La calificación global mínima para aprobar la asignatura es 5,0 sobre 10.

La modalidad por defecto será la A. Acceder a la modalidad B requerirá una justificación sobre la no posibilidad de acudir a las actividades presenciales y la aprobación por parte del profesor que imparta la asignatura.

Advertencia final

La copia o plagio manifiesto de cualquier tarea que forma parte de la evaluación supondrá la imposibilidad de superar la asignatura, sometiéndose seguidamente a los procedimientos disciplinarios oportunos.

Téngase en cuenta que, de acuerdo con el artículo 13 d) del Estatuto del Estudiante Universitario (RD 1791/2010, de 30 de diciembre), "es deber de un estudiante abstenerse en la utilización o cooperación en procedimientos fraudulentos en las pruebas de evaluación, en los trabajos que se realicen o en documentos oficiales de la Universidad".

procedimientos fraudulentos en las pruebas de evaluación, en los trabajos que se realicen o en documentos oficiales de la Universidad".

BIBLIOGRAFÍA

- ATKINS, P.W., de PAULA,J., Química Física, 8ª ed., Ed. Médica Panamericana, 2008. ISBN 9789500612487
- LEVINE, I.N., Fisicoquímica, 5ª ed., McGraw-Hill, 2004. ISBN 9788448137861 (v.1) ISBN 978844137878 (v.2)
- ENGEL, T. y REID, P. Química Física, Pearson Education, 2006 ISBN 10-84-7829-077-X
- ATKINS, P. W, de PAULA, J., Química Física, Physical Chemistry, 9ª ed., Oxford University Press, 2010. ISBN 97801995437878

- LEVINE, I. N., Physical Chemistry, 6ª ed., McGraw-Hill, 2008. ISBN 9780072538625 (v.1) ISBN 9780071276368 (v.2)
- BERTRAN, J. y col., Química Cuántica: Fundamentos y aplicaciones computacionales, 2ª ed., Síntesis, 2002.
- HANNA, W., Mecánica Cuántica para Químicos, Fondo Educativo Interamericano, 1985.
- PLANELLES, J., CLEMENTE, I. y GABRIEL, J., Noves Notes de Química Cuàntica, Publicacions de la Universitat Jaume I, 2ªed, 2010. www.uji.es/bin/publ/edicions/quimicaq.pdf.
- McQUARRIE, D. A., Quantum Chemistry, 2ª ed, University Science Books; 2007.
- BROWN, J. M., Molecular Spectroscopy, Oxford University Press, 1998.
- BANWELL, C. N. y McCASH, E. M., Fundamentals of Molecular Spectroscopy, 4ª ed., McGraw-Hill, 1994.
- PLANELLES, J. CLEMENTE, I. y GABRIEL, J., Espectroscòpia, Publicacions de la Universitat Jaume I, 2002.
- DIAZ PEÑA, M. y ROIG MUNTANER, A., Química Física, Vol. 1, Alhambra, 1972.
- CRUZ-GARRITZ, D., CHAMIZO, J. A. y GARRITZ, A., Estructura atómica: un enfoque químico, Addison-Wesley Iberoamericana, 1987.
- LEVINE, I.N., Química Cuantica, 5ª ed., Prentice Hall, 2001.
- REQUENA, A. y ZUÑIGA, J., Espectroscopia, Pearson Prentice Hall, 2003.
- HOLLAS, J. M., Modern Spectroscopy, 2ª ed., John Wiley & Sons, 1992.
- BARROW, G. M., Introduction to Molecular Spectroscopy, McGraw-Hill, 1962.