

**FITXA IDENTIFICATIVA****DADES DE L'ASSIGNATURA**

Codi: 36451
Nom: Química Física II
Cicle: Grau
Crèdits ECTS: 6
Curs acadèmic: 2026-27

TITULACIONS

Titulació	Centre	Curs	Període
1110 - Grau de Química	Facultat de Química	3	Primer quadrimestre
1934 - Doble Grau en Química i Enginyeria Química	Facultat de Química	3	Primer quadrimestre

MATÈRIES

Titulació	Matèria	Caràcter
1110 - Grau de Química	Química Física	OBLIGATÒRIA
1934 - Doble Grau en Química i Enginyeria Química	Tercer curs	OBLIGATÒRIA

COORDINACIÓ

GIMENEZ ROMERO DAVID

RESUM

Amb l'assignatura de **Química Física II** es pretén, essencialment, que l'alumne adquirisca coneixements bàsics de dues parts fonamentals de la Química-Física, com són la Química Quàntica i l'Espectroscòpia. La Química Quàntica consisteix en l'aplicació de la Física Quàntica a l'estudi de l'estructura atòmica i molecular. L'Espectroscòpia es pot definir com l'estudi de la interacció de la radiació electromagnètica amb la matèria i utilitza principalment coneixements de Química Quàntica. Ambdues matèries són cada vegada més interdisciplinàries, ja que s'usen comunament en altres branques de la química.

Per tant, amb aquesta assignatura s'establiran les bases necessàries perquè l'estudiant pugui abordar posteriorment amb èxit l'estudi de diferents parts de la Química i de la pròpia Química Física, que utilitzen habitualment els conceptes de Química Quàntica i Espectroscòpia.

els conceptes de Química Quàntica i Espectroscòpia.

CONEIXEMENTS PREVIS

**RELACIÓ AMB ALTRES ASSIGNATURES DE LA MATEIXA TITULACIÓ**

No s'ha especificat restriccions de matrícula amb altres assignatures del pla d'estudis.

ALTRES TIPUS DE REQUISITS

Aquesta assignatura no té restriccions de matrícula amb cap altra de la titulació. En tot cas, per tal de poder abordar amb èxit l'assignatura, són imprescindibles coneixements bàsics previs, del nivell exigít en el primer curs del Grau en Química, en:

- Mecànica i Electromagnetisme (Física I i II).
- Estructura atòmica i molecular (Química I).
- Matemàtiques: logaritmes, exponencials, nombres complexos, derivades i integrals senzilles, equacions diferencials ordinàries i fonaments d'estadística.

COMPETÈNCIES / RESULTATS D' APRENTATGE**1110 - Grau de Química**

Actuar amb autonomia en l'aprenentatge, prenent decisions fonamentades en diversos contextos, emetent judicis sobre la base de l'experimentació i l'anàlisi i transferint el coneixement a noves situacions.

Al final de la matèria, l'estudiantat ha d'interpretar la relació de la variació de les propietats característiques dels elements químics amb la taula periòdica.

Al final de la matèria, l'estudiantat ha d'utilitzar correctament la terminologia química, nomenclatura, convenis i unitats.

Al final de la matèria, l'estudiantat ha de relacionar teoria i experimentació.

Al final de la matèria, l'estudiant ha d'abordar nous problemes i plantejar estratègies per a solucionar-los.

Al final de la matèria, l'estudiant ha d'enumerar els principis de la mecànica quàntica i aplicar-los a la descripció de l'estructura i propietats d'àtoms i molècules.

Al final de la matèria, l'estudiant ha d'enunciar els principis de termodinàmica i cinètica i les aplicacions d'aquestes en química.

Al final de la matèria, l'estudiant ha d'identificar els processos químics en la vida diària.

Al final de la matèria, l'estudiant ha d'identificar els tipus principals de reaccions químiques i les principals característiques associades a aquestes.

Al final de la matèria, l'estudiant ha de demostrar capacitat d'anàlisi, síntesi i raonament crític.

Al final de la matèria, l'estudiant ha de demostrar capacitat inductiva i deductiva.

Al final de la matèria, l'estudiant ha de distingir els aspectes qualitius i quantitius dels problemes químics.

Al final de la matèria, l'estudiant ha de poder descriure les característiques i comportament dels diversos



estats de la matèria i les teories utilitzades per a explicar-los.

Al final de la matèria, l'estudiant ha de poder implementar metodologies sostenibles i respectuoses amb el medi ambient.

Al final de la matèria, l'estudiant ha de relacionar la química amb altres disciplines.

Al final de la matèria, l'estudiant ha de resoldre problemes de manera efectiva.

Col·laborar eficaçment en equips de treball, assumint responsabilitats i funcions de lideratge i contribuint a la millora i desenvolupament col·lectiu.

Conèixer i comprendre, des de l'àmbit de la titulació, les desigualtats per raó de sexe i gènere en la societat; integrar les diverses necessitats i preferències per raó de sexe i de gènere en el disseny de solucions i resolució de problemes.

Contribuir en el disseny, desenvolupament i execució de solucions que donen resposta a demandes socials, tenint en compte com a referent els objectius de desenvolupament sostenible.

Demostrar raonament crític i autocrític en l'àmbit de la titulació, considerant aspectes com ara l'ètica professional, els valors morals i les implicacions socials de les diverses activitats realitzades.

Expressar-se correctament, tant de forma oral com escrita, en qualsevol de les llengües oficials de la Comunitat Valenciana.

Proposar solucions creatives i innovadores a situacions o problemes complexos, propis de l'àmbit de coneixement, per a donar resposta a les diverses necessitats professionals i socials.

Saber comunicar-se de manera efectiva, tant de manera oral com escrita, adaptant-se a les característiques de la situació i de l'audiència.

DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

1. Conceptes bàsics. Principis de la Mecànica Quàntica

Desenvolupament de la teoria quàntica. Dualitat ona-corpúscle. Equació de Schrödinger. Formalisme matemàtic. Postulats de la mecànica quàntica. Estats estacionaris. Principi d'incertesa

2. Sistemes model

Moviment de translació: partícula en un recinte unidimensional. Partícula en un recinte bidimensional. Tècnica de separació de variables. Barreres finites i efecte túnel. Moviment vibracional: Oscil·lador harmònic.



3. Àtom d'hidrogen

Introducció. Moment angular orbital. Rotor rígid. Àtom d'hidrogen: plantejament de la solució formal de l'equació de Schrödinger. Energies i funcions dels estats lligats. Moment angular de spin.

4. Àtoms polielectrònics

Àtoms polielectrònics: plantejament general. Mètodes aproximats. Àtom d'Heli. Aproximació orbital. Principi de anti-simetria. Orbitals autoconsistents (SCF). Estats electrònics.

5. Estructura molecular

Molècules polielectròniques: plantejament general. Aproximació de Born-Oppenheimer. La molècula ió d'hidrogen (mètode OM-CLOA). La molècula d'hidrogen. Molècules diatòmiques. Molècules poliatòmiques. Sistemes pi-electrònics. Mètode de Hückel.

6. Fonaments d'Espectroscòpia

La radiació electromagnètica. Espectroscòpia: tipus d'espectres. Interacció radiació matèria: aproximació semi-clàssica. Llei de distribució de Boltzmann. El senyal espectroscòpic: posició, intensitat i amplària. Intensitat d'un senyal espectroscòpic. Llei de Lambert-Beer. Emissió làser

7. Espectroscòpies de Rotació i Vibració

Espectroscòpies de moviment nuclear col·lectiu. Nivells d'energia rotacional de molècules diatòmiques i lineals. Espectres de rotació pura. Espectroscòpia de microones. Nivells d'energia vibracional. Espectres de vibració de molècules diatòmiques. Espectres de rotació-vibració. Espectres de vibració de molècules poliatòmiques: modes normals de vibració. Espectroscòpia IR. Espectroscòpia Raman.

8. Espectroscòpia Electrònica

Interpretació quàntica dels espectres electrònics: molècules diatòmiques. Estructura vibracional: principi de Franck-Condon. Regles de selecció. Espectroscòpia electrònica de molècules poliatòmiques. Fluorescència i fosforescència.

VOLUM DE TREBALL (HORES)

ACTIVITATS PRESENCIALS

Activitat	Hores
-----------	-------



Tutories	9,00
Teoria	51,00
Total hores	60,00

ACTIVITATS NO PRESENCIALS

Activitat	Hores
Assistència a altres activitats	0,00
Elaboració de treballs individuals o en grup	0,00
Estudi i treball autònom	90,00
Preparació de classes	0,00
Preparació d'activitats d'avaluació	0,00
Resolució de casos pràctics	0,00
Total hores	90,00

METODOLOGIA DOCENT

El desenvolupament de l'assignatura s'estructura al voltant dels següents eixos:

- les classes teòriques
- les tutories grupals

Pel que fa a les primeres, en elles s'oferirà una visió global del tema tractat i s'incidirà en aquells conceptes clau necessaris per a la seua comprensió. Així mateix, s'indicaran els recursos més recomanables per a la preparació posterior del tema en profunditat.

Les tutories es dedicaran al plantejament i resolució de problemes i qüestions, les quals permetran identificar els elements i conceptes essencials de cada tema. Per a aquestes sessions, es proporcionarà una llista de qüestions i problemes que servirà per reforçar els coneixements i exercitar-se en cadascun dels aspectes tractats. L'alumne/a haurà de lliurar resolta els problemes i qüestions que el Professor indique.

el Professor indique.

AVALUACIÓ

S'utilitzaran els següents sistemes d'avaluació:

- Proves consistents en Exàmens Escrits, Orals i/o Pràctics.
- Avaluació de les sessions de tutories grupals, seminaris, elaboració de treballs i/o exposicions orals.
- Avaluació contínua de cada alumne basada en les activitats presencials, participació i grau d'implicació en el procés d'ensenyament-aprenentatge.



L'avaluació de l'aprenentatge dels estudiants tindrà en compte tots els aspectes exposats en l'apartat de metodologia d'esta guia docent.

Modalitat A

PRIMERA CONVOCATÒRIA

La qualificació final constarà de:

L'examen (75%), que consistirà en una sèrie de qüestions teòriques i problemes numèrics, els quals tractaran sobre els conceptes bàsics impartits en classe. L'examen serà el mateix per a tots els grups.

Avaluació contínua (25%), que contempla proves d'avaluació realitzades al llarg del curs en forma de tests de resposta múltiple o breu, l'avaluació de les sessions de tutories grupals, mitjançant la realització i/o lliurament d'exercicis i qüestions, i l'avaluació contínua de cada alumne basada en la participació i grau d'implicació en el procés d'ensenyament-aprenentatge. **Únicament en casos excepcionals i en el termini establert pels professors, es podrà renunciar a esta modalitat A.**

La qualificació mínima de l'examen escrit haurà de ser igual o superior a 4,5 sobre 10 per a poder fer una mitjana amb la nota de l'avaluació contínua. La qualificació global mínima per a aprovar l'assignatura és 5,0 sobre 10.

SEGONA CONVOCATÒRIA

En la segona convocatòria els estudiants realitzaran un examen consistent en una sèrie de qüestions teòriques i problemes numèrics, els quals tractaran sobre els conceptes bàsics impartits en classe. L'examen serà el mateix per a tots els grups. La qualificació final, incloent-hi l'avaluació contínua, es realitzarà utilitzant la mateixa ponderació que en la primera convocatòria. La qualificació global mínima per a aprovar l'assignatura és 5,0 sobre 10.

Modalitat B

Esta modalitat únicament s'acceptarà en aquells casos molt excepcionals en els quals el professor haja acceptat la sol·licitud de l'estudiant.



PRIMERA I SEGONA CONVOCATÒRIA

La qualificació final constarà de l'examen (90%) i de les activitats d'avaluació contínua (10%).

La qualificació mínima de l'examen escrit haurà de ser igual o superior a 4,5 sobre 10 per a poder fer una mitjana amb la nota de l'avaluació contínua. La qualificació global mínima per a aprovar l'assignatura és 5,0 sobre 10.

La modalitat per defecte serà l'A. Accedir a la modalitat B requerirà una justificació sobre la no possibilitat d'acudir a les activitats presencials i l'aprovació per part del professor que impartisca l'assignatura.

Advertiment final

La còpia o plagi manifest de qualsevol tasca que forma part de l'avaluació suposarà la impossibilitat de superar l'assignatura, sotmetent-se seguidament als procediments disciplinaris oportuns.

Tinga's en compte que, d'acord amb l'article 13 d) de l'Estatut de l'Estudiant Universitari (RD 1791/2010, de 30 de desembre), "és deure d'un estudiant abstenir-se en la utilització o cooperació en procediments fraudulents en les proves d'avaluació, en els treballs que es realitzen o en documents oficials de la Universitat".

o cooperació en procediments fraudulents en les proves d'avaluació, en els treballs que es realitzen o en documents oficials de la Universitat".

BIBLIOGRAFIA

- 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, 6^a ed., McGraw-Hill, 2008. ISBN 9780072538625 (v.1) ISBN 9780071276368 (v.2)
- BERTRAN, J. y col., Química Cuántica: Fundamentos y aplicaciones computacionales, 2^a 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, 2^aed, 2010. www.uji.es/bin/publ/edicions/quimicaq.pdf.
- McQUARRIE, D. A., Quantum Chemistry, 2^a 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, 4^a 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, 5^a ed., Prentice Hall, 2001.
- REQUENA, A. y ZUÑIGA, J., Espectroscopia, Pearson Prentice Hall, 2003.
- HOLLAS, J. M., Modern Spectroscopy, 2^a ed., John Wiley & Sons, 1992.
- BARROW, G. M., Introduction to Molecular Spectroscopy, McGraw-Hill, 1962.