



GUÍA DOCENTE 2012-2013

**Química Física II: Espectroscopia y Termodinámica
Estadística**

1. Denominación de la asignatura:

Química Física II: Espectroscopia y Termodinámica Estadística

Titulación

Grado de Química

Código

5275

2. Materia o módulo a la que pertenece la asignatura:

Química Física

3. Departamento(s) responsable(s) de la asignatura:

Química

4.a Profesor que imparte la docencia (Si fuese impartida por mas de uno/a incluir todos/as) :

Saturnino Ibeas Cortés y Santiago Aparicio Martínez



4.b Coordinador de la asignatura

Saturnino Ibeas Cortés

5. Curso y semestre en el que se imparte la asignatura:

2 curso 1 semestre

6. Tipo de la asignatura: (Básica, obligatoria u optativa)

Obligatoria

7. Requisitos de formación previos para cursar la asignatura:

No se han establecido requisitos previos

8. Número de créditos ECTS de la asignatura:

6

9. Competencias que debe adquirir el alumno/a al cursar la asignatura

De acuerdo con la memoria del grado, las competencias que se trabajarán en la asignatura son:

Transversales: T2,T6,T9,T10,T17,T18.

Genéricas: G4,G12.

Específicas: E2,E12,E13.

10. Programa de la asignatura

10.1- Objetivos docentes

- O1.- Adquirir conocimientos básicos de simetría y su aplicación en espectroscopia.
O2.- Conocer los fundamentos de la espectroscopia.
O3.- Comprender la base teórica de la termodinámica estadística y como ésta es el nexo de unión entre el mundo macroscópico y microscópico.



10.2- Unidades docentes (Bloques de contenidos)

Simetría Molecular

Tema 1: Simetría molecular.

Elementos y operaciones de simetría. Clasificación de las moléculas según su simetría. Grupos de simetría, subgrupos y clases. Nomenclatura matricial. Representaciones de grupos. Tabla de caracteres. Representación de los $3N$ vectores cartesianos de desplazamiento. Representaciones de grupos cíclicos

Fundamentos de Espectroscopia

Tema 2: Principios básicos de espectroscopia

Introducción. Reglas de Selección. Transiciones espectroscópicas. Fotometría de absorción. Razón señal-ruido, resolución y anchura. Zonas del espectro.

Tema 3: Espectroscopia de microondas

Introducción. Rotor rígido. Intensidad de las bandas. Rotor no rígido. Efecto Stark. Clasificación de las moléculas

Tema 4: Espectroscopia de infrarrojos y Raman

Espectroscopia de infrarrojos. Vibración: Moléculas diatómicas. Anarmonicidad. Moléculas poliatómicas. Población de niveles de vibración. Vibración y rotación: Moléculas diatómicas. Influencia de la vibración sobre la rotación. Efecto isotópico. Moléculas poliatómicas lineales. Efecto del spin nuclear. Otras moléculas poliatómicas. Espectroscopia Raman: Espectro Raman de rotación pura. Espectro Raman de vibración. Vibraciones activas en Raman. Simetría de los modos normales de vibración.

Tema 5: Espectroscopia UV-Vis

Espectroscopia de adsorción: Moléculas diatómicas: Estructura basta vibracional: Progresiones. Principio de Franck-Condon. Energía y productos de disociación. Estructura fina rotacional. Moléculas poliatómicas: Principales tipos de tránsitos electrónicos. Localización y deslocalización de electrones. Aplicaciones. Espectroscopia de emisión: Introducción. Procesos fotofísicos y fotoquímicos. Rendimientos cuánticos. Cinética de los procesos fotofísicos: Procesos de interconversión entre estados y Desactivación bimolecular (Quenching). Ecuación de Stern-Volmer.

Tema 6: Espectroscopia de resonancia de spin

Resonancia magnética nuclear: Momentos magnéticos nucleares. Energías de los núcleos en campos magnéticos. Desplazamiento químico. Estructura fina, acoplamiento. Resonancia de spin electrónico: El factor g. Estructura hiperfina.



Termodinámica Estadística

Tema 7: Partículas independientes no localizadas

El gas ideal como asamblea de partículas independientes no localizadas: Ecuación de Estado. Contribución de las funciones de partición a la energía, calor específico y entropía.- Principio de equipartición de la energía. Mezcla de gases ideales: Evaluación de las constantes de equilibrio.

Tema 8: Gases reales

Introducción. Función de Partición clásica. Ley de distribución de velocidades de Maxwell-Boltzmann. Fuerzas intermoleculares. Integral de configuración. Ecuación de Estado: consideraciones elementales. Ecuación del Virial. Potenciales intermoleculares: Esferas rígidas, Lennard-Jones, Stockmayer y Kihara. Segundo coeficiente del Virial en términos de la Integral de Configuración.

Tema 9: Partículas independientes localizadas

El cristal atómico como una asamblea de partículas independientes localizadas. Teoría clásica de C_v : Reglas de Dulong-Petit, Kopp-Newman y Debye. Función de partición de vibración: Modelo de Einstein. Limitaciones. Modelo de Debye. Limitaciones. Entropía de sólidos cristalinos. Entropía residual.

10.3- Bibliografía

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

- A. Maczek, (1998) Statistical Thermodynamics, Ed. Oxford Science Publications,
- Alberto Requena Rodríguez, José Zúñiga Román, (2004) Espectroscopia, Ed. Pearson, Madrid,
- Alberto Requena, José Zúñiga, (2007) QUÍMICA FÍSICA. Problemas de Espectroscopia., Pearson Educación S.A., Madrid, 978-84-8322-367-3,
- C.E. Hetch. Ed. Freeman and Co, (1990) Statistical Thermodynamics and Kinetic Theory,
- Díaz Peña y A. Roig Muntaner, (1989) Química Física. vol1, Editorial Alambra, Madrid,
- F. Albert Cotton, (1983) La teoría de grupos aplicada a la Química, Editorial Limusa, Mexico,
- F.W. Sears; G.L. Salinger, (1980) Termodinámica, teoría cinética y termodinámica estadística, Editorial Reverté,
- Levine, I. N, (1979) Espectroscopia molecular, Editorial AC, Madrid,
- M. Díaz Peña, (1979) Termodinámica estadística, Ed. Alambra,



Raymon Chang, (1977) Principios básicos de la espectroscopia, Editorial AC, Madrid,
Victor Luaña, (2002) Espectroscopia molecular, Servicio de publicaciones de la
Universidad de Oviedo, Oviedo,

11. Metodología de enseñanza y aprendizaje y su relación con las competencias que debe adquirir el estudiante:

Metodología	Competencia relacionada	Horas presenciales	Horas de trabajo	Total de horas
Clases teóricas	T17, G4, E2, E12, E13	34	43	77
Seminarios y debates	T6, T10, T17, T18, G4, G12, E2	10	15	25
Realización de trabajos e informes	T2, T6, T9, T17, G4, E2, E12, E13	0	28	28
Tutorías	T6, T17, E2, E12, E13	5	0	5
Pruebas escritas	T2, T6, T17, G4, E2, E12, E13	5	10	15
Total		54	96	150

12. Sistemas de evaluación:

Evaluación continua a lo largo del semestre. El alumno debe obtener como mínimo un 3 sobre 10 en cada una de los procedimientos de evaluación para realizar la media aritmética ponderada. Para aprobar la asignatura, la nota media aritmética ponderada debe de ser igual o superior a 5 sobre 10. Todos los procedimientos son recuperables en la segunda convocatoria.

Procedimiento	Peso en la calificación final
Resolución de problemas propuestos en clase	30 %
Resolución de cuestionarios	30 %
Pruebas escritas a lo largo del semestre	40 %
Total	100 %



13. Recursos de aprendizaje y apoyo tutorial:

Se realizarán a través de la plataforma MOODLE.

14. Calendarios y horarios:

Tanto el calendario académico como los horarios se encuentran publicados en la página WEB del Grado: www.ubu.es/quimica

15. Idioma en que se imparte:

Español