



GUÍA DOCENTE 2013-2014

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

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	22	43	65
Seminarios y debates	T6, T10, T17, T18, G4, G12, E2	22	15	37
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
Resolución de problemas propuestos en clase	30 %
Resolución de cuestionarios	30 %
Pruebas escritas a lo largo del semestre	40 %
Total	100 %

Evaluación excepcional:

Se ajustarán individualmente los diferentes procedimientos de evaluación de los alumnos que soliciten la evaluación excepcional para que puedan hacer las diferentes pruebas.



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