

**Proyecto/Guía docente de la asignatura**

Se debe indicar de forma fiel como va a ser desarrollada la docencia en la Nueva Normalidad. Esta guía debe ser elaborada teniendo en cuenta todos los profesores de la asignatura. Conocidos los espacios y profesorado disponible, se debe buscar la máxima presencialidad posible del estudiante siempre respetando las capacidades de los espacios asignados por el centro y justificando todas las adaptaciones que se realicen respecto a la memoria de verificación Si la docencia de alguna asignatura fuese en parte online, deben respetarse los horarios tanto de clase como de tutorías).

Asignatura	QUÍMICA FÍSICA II		
Materia	QUÍMICA FÍSICA		
Módulo			
Titulación	GRADO EN QUÍMICA		
Plan	472	Código	45953
Periodo de impartición	Segundo cuatrimestre, 2º Curso	Tipo/Carácter	OB
Nivel/Ciclo	GRADO	Curso	2º
Créditos ECTS	6		
Lengua en que se imparte	ESPAÑOL		
Profesor/es responsable/s	GRUPO 1: Juan Carlos López Alonso GRUPO 2: Isabel Peña calvo		
Datos de contacto (E-mail, teléfono...)	juancarlos.lopeza@uva.es mipencal@uva.es		
Horario de tutorías			
Departamento	Química Física y Química Inorgánica		
Fecha de revisión por el Comité del Título	17/07/2023		



1. Situación / Sentido de la Asignatura

1.1 Contextualización

En el Plan de Estudios del Grado en Química, el alumno, tras cursar el bloque básico, comienza el bloque fundamental dedicado a materias más específicas de las diferentes áreas de la Química, entre las que se encuentra la Química Física, área a la que pertenece esta asignatura.

1.2 Relación con otras materias

La asignatura Química Física II emplea conocimientos adquiridos en la asignatura Química Física I cursada en el primer cuatrimestre del segundo curso. La asignatura, también está estrechamente relacionada con otra de segundo curso, la Química Experimental II, pues parte de ésta se dedica a llevar a la práctica, en laboratorio, los conocimientos teóricos de Química Física II.

1.3 Prerrequisitos

Para cursar la Química Física II es recomendable haber superado la asignatura Química Física I.





2. Competencias

G1, G2, G3, G4, G8, G9, EC1, EC2, EC3, EC7, EC8, EH1, EH2, EH3, EH4, EH5, EH6 (Según el punto 3.2 y 5.1 de la memoria de verificación del plan de estudios de Graduado en Química)

2.1 Generales

- G.1- Ser capaz de comunicarse con corrección tanto de forma oral como escrita.
- G.2- Ser capaz de resolver problemas tanto de naturaleza cualitativa como cuantitativa y de tomar decisiones.
- G.3- Ser capaz de encontrar y manejar información, tanto de fuentes primarias como secundarias.
- G.4- Ser capaz de trabajar de forma eficaz y autónoma mediante la planificación y la organización de su trabajo y de su tiempo.
- G.8- Poseer los hábitos, capacidad de aprendizaje y autonomía necesarios para proseguir su formación posterior.
- G.9- Conocer y apreciar las responsabilidades éticas y profesionales.

2.2 Específicas

- EC.1- Conocer y manejar los aspectos principales de terminología química.
- EC.2- Conocer la Tabla Periódica, su utilidad y las tendencias periódicas en las propiedades de los elementos.
- EC.3- Conocer los modelos y principios fundamentales de enlace entre los átomos, los principales tipos de compuestos a que esto da lugar y las consecuencias en la estructura y propiedades de los mismos.
- EC.7- Conocer los métodos fundamentales de análisis y caracterización estructural de compuestos químicos.
- EC.8- Reconocer aquellos aspectos dentro de la química que son interdisciplinarios o que suponen una frontera en el conocimiento.
- EH.1- Ser capaz de demostrar el conocimiento y comprensión de conceptos, principios y teorías esenciales en relación con la química.
- EH.2- Ser capaz de aplicar los conocimientos adquiridos a la resolución de problemas cualitativos y cuantitativos.
- EH.3- Ser capaz de reconocer y analizar un problema y plantear estrategias para su resolución.
- EH.4- Ser capaz de analizar, interpretar y evaluar información química y datos químicos.
- EH.5- Ser capaz de comunicar información química y argumentar sobre ella.
- EH.6- Manejar las herramientas computacionales y de tecnología de la información básicas para el procesamiento de datos e información química.



3. Objetivos

- Conocer los principios de la Mecánica Cuántica y su aplicación a la descripción de las propiedades de los átomos y las moléculas
- Conocer los fundamentos de la interacción radiación-materia, el origen de los fenómenos espectroscópicos, su fundamento cuántico y las diferentes técnicas de investigación estructural.
- Explicar conocimientos básicos sobre distintas técnicas espectroscópicas modernas, qué información - proporcionan y en qué condiciones son aplicables.
- Comprender y predecir el comportamiento y reactividad de átomos y moléculas a partir del análisis de su estructura, que podrá determinarse a partir de datos espectroscópicos.
- Describir el funcionamiento y manejo de láseres y su aplicación en espectroscopia
- Reconocer la importancia científica de la Química Física y su impacto en la sociedad industrial y tecnológica.
- Comprender y utilizar la información bibliográfica y técnica referida a los fenómenos fisicoquímicos.

Estos resultados implican la adquisición, de forma completa o parcial de las competencias que se indican más arriba (algunas competencias se adquieren o perfeccionan a lo largo de todo el periodo formativo del grado).

4. Contenidos y/o bloques temáticos

Bloque 1: "Fundamentos"

Carga de trabajo en créditos ECTS: 2

a. Contextualización y justificación

La asignatura está estructurada en tres bloques. En el primero se introducen los elementos de la teoría de grupos necesarios para el estudio de la estructura de moléculas poliatómicas, así como los fundamentos de los procesos de interacción radiación-materia presentes en todas las técnicas experimentales propias de la espectroscopia molecular y que se desarrollaran en los siguientes bloques. Como base para entender la naturaleza de la materia, se hace uso en esta asignatura de los conceptos básicos de la mecánica cuántica introducidos en la asignatura Química Física I que se completan con una herramienta imprescindible para el estudio de los sistemas moleculares como es la Simetría Molecular y la herramienta de la teoría de grupos. La Espectroscopía Molecular estudia la interacción de la radiación electromagnética y la materia, con objeto de estudiar los niveles de energía moleculares, a su vez, íntimamente relacionados con la estructura y propiedades moleculares. En este contexto, resulta fundamental introducir los conceptos básicos de la naturaleza dual de la radiación electromagnética y los fundamentos de su interacción con las moléculas que proporcionan al alumno una base firme para entender la Espectroscopía Molecular.

b. Objetivos de aprendizaje

Conocer los fundamentos de la interacción radiación-materia, el origen de los fenómenos espectroscópicos, su fundamento cuántico y las diferentes técnicas de investigación estructural.

Conocer los conceptos básicos de la Simetría Molecular, y la herramienta que nos permite introducir la simetría en el contexto de la Química cuántica, la Teoría de Grupos puntuales que permite simplificar de forma notable es estudio teórico y experimental de los sistemas moleculares mediante la Espectroscopía Molecular.

c. Contenidos

Espectroscopía: Fundamentos.

Radiación electromagnética y materia. - Procesos resonantes y no resonantes: Dispersión. - Tratamiento clásico y semiclásico de la interacción radiación-materia. - Emisión espontánea. - Reglas de selección.- Niveles de energía y regiones del espectro electromagnético.- Población de niveles: Intensidades.- Ley de Bouger-Lambert-Beer.- Forma y anchura de línea.- Técnicas experimentales.

Simetría Molecular.

Introducción. - Elementos y Operaciones de Simetría. - Estructura de Grupo: Grupos Puntuales. - Determinación del Grupo Puntual: Notación de grupos. - Momentos dipolares y actividad óptica. Representación matricial de Grupos. - Teorema de la Gran Ortogonalidad: Tablas de Caracteres. - Reducción de una representación. - Simetría y Química Cuántica. - Producto Directo: Integrales mecanocuánticas y Reglas de Selección.- Operador de Proyección. Aplicaciones de la Teoría de Grupos.

d. Métodos docentes



Las clases teóricas corresponden a lecciones magistrales participativas en las que el alumno interviene mediante la formulación de preguntas al profesor o contestando las que el profesor plantea a lo largo de la impartición de los contenidos.

Las clases de problemas y seminarios consisten en la resolución de ejercicios y casos prácticos previamente preparados por el alumno o planteados durante la clase. Algunos de estos seminarios pueden emplearse para profundizar en conceptos de especial dificultad, haciendo hincapié en sus aspectos más prácticos. Estas clases y el trabajo autónomo de los alumnos para prepararlas son fundamentales para desarrollar las competencias específicas referidas a destrezas y habilidades (EH).

En todos los casos, se utilizarán aquellas T.I.C. que favorezcan la comprensión y participación de los alumnos.

e. Plan de trabajo

Actividades en las sesiones dedicadas a Teoría (PRESENCIALES).

- Clase magistral con exposición de fundamentos teóricos por parte del profesor

Actividades dedicadas a la resolución de Problemas (PRESENCIALES).

- Clases de problemas participativas

Actividades fuera del aula (NO PRESENCIALES)

- Preparación, ampliación y estudio del material

Bloque 2: "TÉCNICAS ESPECTROSCÓPICAS"

Carga de trabajo en créditos ECTS: 2,5

a. Contextualización y justificación

En este bloque se estudian las técnicas espectroscópicas de absorción "clásicas", de rotación o microondas, de vibración o infrarrojo y electrónicas o ultravioleta-visible dedicadas al estudio estructural de moléculas diatómicas y poliatómicas. El estudio se sistematiza atendiendo a la separación de movimientos electrónicos y nucleares basado en la aproximación de Born-Oppenheimer y a la estructura de las moléculas y separando el estudio de moléculas diatómicas y poliatómicas. En cada capítulo se recoge el tratamiento mecanocuántico correspondiente y en el dedicado a espectros electrónicos se hace especial hincapié en el tratamiento mecanocuántico de moléculas poliatómicas no tratado dentro de la asignatura Química Física I. Dentro del apartado de espectroscopías electrónicas se incluyen las técnicas de fluorescencia y fosforescencia

b. Objetivos de aprendizaje

Conocer los fundamentos teóricos y experimentales de las diferentes técnicas espectroscópicas de rotación, vibración.

c. Contenidos

Espectros de Rotación.



Mecánica clásica de la rotación molecular: Clasificación de las moléculas.-Espectros de moléculas diatómicas y lineales.- Población de niveles e intensidad de las transiciones.- Distorsión centrífuga.- Espectros de Trompos simétricos.- Espectros de trompos asimétricos.- Determinación de la estructura molecular. Técnicas experimentales.

Espectros de Vibración.

Osciladores armónico y anarmónico: Niveles de energía. - Potenciales empíricos: Potencial de Morse.- Espectros de vibración: reglas de selección e intensidades.- Energías de disociación.- Espectros de rotación-vibración. Moléculas Poliatómicas: Modos normales. Simetría y Reglas de selección. Frecuencias de grupo.- Técnicas experimentales.

Espectros Electrónicos

Moléculas diatómicas: Estados electrónicos y Reglas de Selección.- Estructura de vibración: Principio de Frank-Condon.- Energías de disociación. Estructura y espectros electrónicos de moléculas poliatómicas.- Fluorescencia y fosforescencia.- Espectroscopía de UV-VIS: Técnicas experimentales y aplicaciones analíticas.

d. Métodos docentes

Las clases teóricas corresponden a lecciones magistrales participativas en las que el alumno interviene mediante la formulación de preguntas al profesor o contestando las que el profesor plantea a lo largo de la impartición de los contenidos.

Las clases de problemas y seminarios consisten en la resolución de ejercicios y casos prácticos previamente preparados por el alumno o planteados durante la clase. Algunos de estos seminarios pueden emplearse para profundizar en conceptos de especial dificultad, haciendo hincapié en sus aspectos más prácticos. Estas clases y el trabajo autónomo de los alumnos para prepararlas son fundamentales para desarrollar las competencias específicas referidas a destrezas y habilidades (EH).

En todos los casos, se utilizarán aquellas T.I.C. que favorezcan la comprensión y participación de los alumnos.

e. Plan de trabajo

Actividades en las sesiones dedicadas a Teoría (PRESENCIALES).

- Clase magistral con exposición de fundamentos teóricos por parte del profesor

Actividades dedicadas a la resolución de Problemas (PRESENCIALES).

- Clases de problemas participativas

Actividades fuera del aula (NO PRESENCIALES)

- Preparación, ampliación y estudio del material

Bloque 3: "LASER y OTRAS TÉCNICAS"

Carga de trabajo en créditos ECTS: 1,5

a. Contextualización y justificación

En este bloque se estudia específicamente el Laser y las técnicas que se derivan de su utilización como fuente de radiación, como la espectroscopía Laser-Raman. Dentro de este apartado se incluyen también las técnicas de espectroscopía fotoelectrónica, con aplicaciones analíticas, pero con una enorme importancia en el estudio de la estructura electrónica de los sistemas moleculares aportando evidencias experimentales de la existencia de los Orbitales Moleculares.

b. Objetivos de aprendizaje



Conocer los fundamentos teóricos y experimentales del Láser, las técnicas espectroscópicas laser y las diferentes espectroscopias fotoelectrónicas

c. Contenidos

Espectros Fotoelectrónicos.

Procesos de fotoelectrónicos.- Espectroscopía fotoelectrónica de UV (UPS) y rayos X (XPS).- Aplicaciones. Técnicas experimentales.

Espectroscopia del Láser.

Fundamentos del láser. Propiedades de la radiación láser.- Tipos de láseres.- Espectroscopía Laser Raman.- Fluorescencia Inducida por Laser.- Espectroscopías de ionización multifotónica.- Otras aplicaciones químicas y espectroscópicas.

d. Métodos docentes

Las clases teóricas corresponden a lecciones magistrales participativas en las que el alumno interviene mediante la formulación de preguntas al profesor o contestando las que el profesor plantea a lo largo de la impartición de los contenidos.

Las clases de problemas y seminarios consisten en la resolución de ejercicios y casos prácticos previamente preparados por el alumno o planteados durante la clase. Algunos de estos seminarios pueden emplearse para profundizar en conceptos de especial dificultad, haciendo hincapié en sus aspectos más prácticos. Estas clases y el trabajo autónomo de los alumnos para prepararlas son fundamentales para desarrollar las competencias específicas referidas a destrezas y habilidades (EH).

En todos los casos, se utilizarán aquellas T.I.C. que favorezcan la comprensión y participación de los alumnos.

e. Plan de trabajo

Actividades en las sesiones dedicadas a Teoría (PRESENCIALES).

- Clase magistral con exposición de fundamentos teóricos por parte del profesor

Actividades dedicadas a la resolución de Problemas (PRESENCIALES).

- Clases de problemas participativas

Actividades fuera del aula (NO PRESENCIALES)

- Preparación, ampliación y estudio del material

Todos los Bloques

f. Evaluación

La evaluación de los alumnos se realizará mediante: a) Seguimiento continuo a través de controles periódicos o evaluación de problemas, trabajos u otras actividades; b) Examen final. En la calificación final tendrá mayor peso la nota obtenida en el examen final. La evaluación de la asignatura se realizará de forma similar en los distintos grupos en que se dividan los alumnos del curso, procurando que el examen final sea el mismo para todos ellos.

g Material docente

Esta sección será utilizada por la Biblioteca para etiquetar la bibliografía recomendada de la asignatura (curso) en la plataforma Leganto, integrada en el catálogo Alma y a la que tendrán acceso todos los profesores y



estudiantes. Es fundamental que las referencias suministradas este curso estén actualizadas y sean completas. Los profesores tendrán acceso, en breve, a la plataforma Leganto para actualizar su bibliografía recomendada ("Listas de Lecturas") de forma que en futuras guías solamente tendrán que poner el enlace permanente a Leganto, el cual también se puede poner en el Campus Virtual.

g.1 Bibliografía básica

"QUÍMICA FÍSICA" Atkins, P. W., de Paula, J.; Editorial Medica Panamericana (2008).

"FISICOQUÍMICA" Levine, I.N., 5ª ed. McGraw Hill (2005).

"FUNDAMENTALS OF MOLECULAR SPECTROSCOPY" Banwell, C.N., McCash, E.M., McGraw-Hill Higher Education; 4ª ed. (1994).

"INTRODUCTION TO MOLECULAR SPECTROSCOPY" Barrow, G.M., McGraw-Hill (1962).

"SPECTRA OF ATOMS AND MOLECULES" Bernath, P., Oxford University Press; 2ª ed. (2005).

h. Bibliografía complementaria

"MOLECULAR PHYSICS" Demtröder, W., Wiley-VCH (2005).

"SYMMETRY AND SPECTROSCOPY" Harris, D. C. y Bertolucci, M. D., Dover Publications (1990).

"MODERN SPECTROSCOPY" Hollas, J. M., John Wiley & Sons (2004).

"MOLECULAR SPECTROSCOPY" Levine, I. N., John Wiley & Sons Inc (1975).

"MOLECULAR SPECTROSCOPY" McHale, J.L., Prentice Hall (1998).

"ESPECTROSCOPÍA" Requena, A. y Zúñiga, J., Pearson Educacion (2004).

"MOLECULES AND RADIATION" Steinfeld, J.I., Dover Publications, 2ª ed. (2005).

g.3 Otros recursos telemáticos (píldoras de conocimiento, blogs, videos, revistas digitales, cursos masivos (MOOC), ...)

Píldoras explicativas, programas de cálculo para la resolución de problemas; cuestionarios de autoaprendizaje y evaluación.

h. Recursos necesarios

La Universidad dispone de aulas con los recursos necesarios para desarrollar las clases teóricas de problemas y los seminarios. La mayor parte de la asignatura se realizará en el aula. Se utilizará equipo informático y de proyección audiovisual. Los alumnos dispondrán en la plataforma MOODLE de la UVa de toda la información básica requerida: Guía docente, contenidos-presentaciones, ejercicios de autoevaluación, colección de problemas para para su uso en clase y trabajo personal.

Para consultas de los alumnos, el horario de tutorías será fijado por cada profesor responsable y se dispondrá de Foros de Consulta en la Plataforma Moodle.



i. Temporalización

BLOQUE TEMÁTICO	CARGA ECTS	PERIODO PREVISTO DE DESARROLLO
1. FUNDAMENTOS	2	Inicio 2º cuatrimestre-2ª semana marzo
2. TÉCNICAS ESPECTROSCÓPICAS	2.5	3ª semana marzo-final de abril
3. OTRAS TÉCNICAS	1.5	Mes de mayo

5. Métodos docentes y principios metodológicos

Las clases teóricas corresponden a lecciones magistrales participativas en las que el alumno interviene mediante la formulación de preguntas al profesor o contestando las que el profesor plantea a lo largo de la impartición de los contenidos.

Las clases de problemas y seminarios consisten en la resolución de ejercicios y casos prácticos previamente preparados por el alumno o planteados durante la clase. Algunos de estos seminarios pueden emplearse para profundizar en conceptos de especial dificultad, haciendo hincapié en sus aspectos más prácticos. Estas clases y el trabajo autónomo de los alumnos para prepararlas son fundamentales para desarrollar las competencias específicas referidas a destrezas y habilidades (EH).

En todos los casos, se utilizarán aquellas T.I.C. que favorezcan la comprensión y participación de los alumnos.

6. Tabla de dedicación del estudiante a la asignatura

ACTIVIDADES PRESENCIALES	HORAS	ACTIVIDADES NO PRESENCIALES	HORAS
Clases teóricas	40	Estudio y trabajo autónomo individual	90
Clases prácticas	10	Estudio y trabajo autónomo grupal	
Laboratorios			
Prácticas externas, clínicas o de campo			
Seminarios	5		
Otras actividades	5		
Total presencial	60	Total no presencial	90

(1) Actividad presencial a distancia es cuando un grupo sigue una videoconferencia de forma síncrona a la clase impartida por el profesor para otro grupo presente en el aula.

7. Sistema y características de la evaluación

Criterio: cuando al menos el 50% de los días lectivos del cuatrimestre transcurran en normalidad, se asumirán como criterios de evaluación los indicados en la guía docente. Se recomienda la evaluación continua ya que implica minimizar los cambios en la agenda.

INSTRUMENTO/PROCEDIMIENTO	PESO EN LA NOTA FINAL	OBSERVACIONES
Controles periódicos, resolución de problemas o casos prácticos, tutorías.	25%	
Examen final en las fechas y convocatorias fijadas por la Facultad de Ciencias	75%	

CRITERIOS DE CALIFICACIÓN

- **Convocatoria ordinaria:**
 - Se seguirán los criterios especificados en la Tabla anterior
- **Convocatoria extraordinaria:**
 - Se efectuará un examen sobre los contenidos de la asignatura

8. Consideraciones finales

En el caso de que hubiera una situación de confinamiento como la acaecida durante el curso 2019-20 se procederá a la modificación de esta guía docente de acuerdo con los criterios establecidos por los Órganos Competentes de La Universidad de Valladolid.



Adenda a la Guía Docente de la asignatura

La adenda debe reflejar las adaptaciones sobre cómo se desarrollaría la formación si tuviese que ser desarrollada en modalidad online por mandato de autoridades competentes. Se deben conservar los horarios de asignaturas y tutorías publicados en la web de la UVa, indicar el método de contacto y suministrar un tiempo razonable de respuesta a las peticiones de tutoría (2-4 días lectivos). Describir el modo en que se desarrollarán las actividades prácticas. En el caso de TFG/TFM, desarrollar detalladamente los sistemas de tutorías y tutela de los trabajos.

A4. Contenidos y/o bloques temáticos

Los Bloques y contenidos son idénticos a los descritos previamente en la Guía Docente para actividad normal

d. Métodos docentes online

Docencia no presencial utilizando la plataforma Moodle (BBCollaborate) u otras plataformas on-line (WebEx, Teams)

Los alumnos dispondrán en la plataforma MOODLE de la Uva:

- Documentación de los contenidos teóricos y prácticos de la asignatura
- Píldoras docentes
- Foros para discusión de contenidos teóricos y prácticos.
- Cuestionario de evaluación
- Entrega de actividades

- Cisco WebEx, BBCollaborate o Teams:

- Clases online en directo
- Presentaciones, discusiones y encuestas online en directo

e. Plan de trabajo online

Clases de teoría on-line

Resolución y dudas de problemas on-line.

Cuestionarios, actividades, foros, píldoras de aprendizaje, videos, material docente a través de plataforma Moodle

A6. Tabla de dedicación del estudiante a la asignatura

ACTIVIDADES PRESENCIALES A DISTANCIA ⁽²⁾	HORAS	ACTIVIDADES NO PRESENCIALES	HORAS
Clases teóricas	40	Estudio y trabajo autónomo individual	50
Clases problemas y seminarios	10	Realización de actividades	25
Otras actividades	10	Preparación de trabajo y controles	15
Total presencial a distancia	60	Total no presencial	90
Total presencial a distancia + no presencial			150

⁽²⁾ Actividad presencial a distancia en este contexto es cuando el grupo sigue por videoconferencia la clase impartida por el profesor en el horario publicado para la asignatura.

A7. Sistema y características de la evaluación

Criterio: cuando más del 50% de los días lectivos del cuatrimestre transcurran en situación de contingencia, se asumirán como criterios de evaluación los indicados en la adenda.

INSTRUMENTO/PROCEDIMIENTO	PESO EN LA NOTA FINAL	OBSERVACIONES
Resolución de problemas o casos prácticos, tutorías, Control Bloque 1.	25%	
Examen final	75%	

CRITERIOS DE CALIFICACIÓN

- **Convocatoria ordinaria:**
 - Se seguirán los criterios especificados en la Tabla anterior
- **Convocatoria extraordinaria:**
 - Se efectuará un examen sobre los contenidos de la asignatura