



Asignatura: QUÍMICA FÍSICA II  
Código: 16362  
Centro: Ciencias  
Titulación: Grado en Química  
Nivel: Grado  
Tipo: Obligatoria  
Nº de créditos: 12 ECTS

## ASIGNATURA / COURSE TITLE

QUÍMICA FÍSICA II / PHYSICAL CHEMISTRY

### 1.1. Código / Course number

16362

### 1.2. Materia / Content area

QUÍMICA FÍSICA / PHYSICAL CHEMISTRY

### 1.3. Tipo / Course type

Formación obligatoria / Compulsory subject

### 1.4. Nivel / Course level

Grado / Bachelor (first cycle)

### 1.5. Curso / Year

3º / 3<sup>rd</sup>

### 1.6. Semestre / Semester

Anual / Annual

### 1.7. Idioma / Language

Español. Se emplea también Inglés en material docente / In addition to Spanish, English is also extensively used in teaching material

### 1.8. Requisitos previos / Prerequisites

Es recomendable haber superado la materia Química Física I, además de las asignaturas: Física, Matemáticas y Estadística. Los alumnos deberán disponer de un nivel de inglés que permita leer la bibliografía de consulta / It is advisable to have passed Physical Chemistry I, in addition to the subjects: Physics, Mathematics and Statistics. Students must have a suitable level of English to read references in this language.



Asignatura: QUÍMICA FÍSICA II  
Código: 16362  
Centro: Ciencias  
Titulación: Grado en Química  
Nivel: Grado  
Tipo: Obligatoria  
Nº de créditos: 12 ECTS

## 1.9. Requisitos mínimos de asistencia a las sesiones presenciales / **Minimum attendance requirement**

La asistencia a las prácticas de la asignatura es obligatoria.  
[Attendance to Laboratory practices is mandatory](#)

## 1.10. Datos del equipo docente / **Faculty data**

### **Coordinador:**

Docente(s) / [Lecturer\(s\)](#) Pendiente de asignación  
Departamento de / [Department of](#) Química Física Aplicada  
Facultad / [Faculty](#) Ciencias  
Despacho - Módulo / [Office - Module](#)  
Teléfono / [Phone](#): +34 91 497  
Correo electrónico/[Email](#): @uam.es  
Página web/[Website](#): <http://www.qfa.uam.es/qf2>  
Horario de atención al alumnado/[Office hours](#):

## 1.11. Objetivos del curso / **Course objectives**

Los objetivos de este curso consisten en que el alumno domine los conceptos básicos de la parte de Química Física descrita en el Programa: Fundamentos de Química Cuántica, Termodinámica Estadística, Espectroscopia Molecular, Espectroscopia de Resonancia Magnética y Macromoléculas y coloides.

## 1.12. Contenidos del programa / **Course contents**

Contenidos Teóricos y Prácticos.  
(**4ECTS** (prácticas de laboratorio), **2,5ECTS** (prácticas en el aula) y **5,5ECTS** (clases expositivas y tutorías).

(La cifra en % que figura entre paréntesis corresponde al peso aproximado del capítulo en el total de la asignatura)

### **PROGRAMA DE TEORÍA**

#### **1.- FUNDAMENTOS DE QUÍMICA CUÁNTICA (50%)**

##### **Antecedentes de la Mecánica Cuántica**

La radiación del cuerpo negro. El efecto fotoeléctrico. Dualidad onda corpúsculo, difracción de electrones. Espectros atómicos



Asignatura: QUÍMICA FÍSICA II  
Código: 16362  
Centro: Ciencias  
Titulación: Grado en Química  
Nivel: Grado  
Tipo: Obligatoria  
Nº de créditos: 12 ECTS

## **Introducción a la Mecánica Cuántica.**

Postulados de la Mecánica Cuántica. Ecuación de Schrödinger. Principio de incertidumbre. La función de onda y su interpretación. Partículas en cajas. Barreras de potencial, efecto túnel. Oscilador armónico. Rotor Rígido.

### **Átomos**

El átomo de Hidrógeno. Átomos hidrogenoides. Orbitales y densidad electrónica. Espín electrónico. Átomos polielectrónicos, aproximación orbital. Configuraciones electrónicas (Principios de Pauli y Aufbau). Términos espectrales. Transiciones entre niveles de energía electrónica.

### **Moléculas y Enlace Químico**

La ecuación de Schrödinger molecular. La aproximación de Born-Oppenheimer. La ecuación de Schrödinger electrónica, orbitales moleculares. La molécula más simple: el  $H_2^+$ . Otras moléculas diatómicas. Moléculas poliatómicas, geometrías moleculares. Superficies de energía potencial. Reacciones químicas.

### **Interacción Radiación-Materia**

El espectro electromagnético. Emisión y absorción de la radiación. Coeficientes de Einstein. Anchura e intensidad de las líneas: Probabilidad de transición, reglas de selección.

## **2. ESPECTROSCOPIA MOLECULAR (30%)**

### **Moléculas Diatómicas**

Movimiento nuclear: Separación rotación-vibración. Rotación: niveles de energía, reglas de selección, distribución de poblaciones y sustitución isotópica. Distorsión centrífuga. Vibración: niveles de energía y reglas de selección. Anarmonicidad. Acoplamiento vibración-rotación. Espectroscopia Raman. Espectro electrónico: términos espectroscópicos, principio de Franck-Condon, energía de disociación, estructura vibracional y estructura rotacional. Predisociación.

### **Moléculas Poliatómicas**

Rotación: momentos principales de inercia. Tipos de trompos. Niveles de energía y reglas de selección. Vibración: coordenadas internas y modos



Asignatura: QUÍMICA FÍSICA II  
Código: 16362  
Centro: Ciencias  
Titulación: Grado en Química  
Nivel: Grado  
Tipo: Obligatoria  
Nº de créditos: 12 ECTS

normales de vibración. Espectro vibracional de moléculas poliatómicas. Niveles de energía y reglas de selección. Espectroscopia Raman. Espectroscopia electrónica. Nomenclatura, características de las bandas. Fluorescencia y fosforescencia.

### **Espectroscopías de Resonancia Magnética.**

Momento angular. Momento magnético. Resonancia magnética nuclear: Principios básicos, desplazamiento químico, acoplamiento espín-espín y sistemas de espín. Resonancia de espín electrónico, principios básicos, factor g, constante de acoplamiento hiperfino.

## **3. TERMODINÁMICA ESTADÍSTICA (15%)**

### **Termodinámica Estadística**

Macroestados y microestados. Postulado de Boltzmann. Distribución más probable. Estadística de Maxwell-Boltzmann. Función de partición. Estadística de Bose-Einstein. Estadística de Fermi-Dirac .

### **Funciones de Partición.**

Sistemas de partículas no interaccionantes. Separación de las funciones de partición: electrónica, traslacional, vibracional, rotacional y nuclear. Funciones termodinámicas en términos de la función de partición. Aplicaciones.

## **4. MACROMOLECULAS (5%)**

Clasificación: coloides, polímeros naturales y polímeros sintéticos. Estructura química, tamaño y conformaciones de las macromoléculas. Estabilidad energética. Polidispersidad: masa molar y su medida. Polímeros sintéticos: cinética, mecanismo y grado de polimerización. Polimerización por adición, condensación y con apertura de anillo.

## **PROGRAMA DE PRÁCTICAS.**

**Se realizarán prácticas sobre los siguientes temas:**

Resolución de sistemas modelo: Pozos de potencial, barreras y efecto túnel.

Espectros atómicos.



Asignatura: QUÍMICA FÍSICA II  
Código: 16362  
Centro: Ciencias  
Titulación: Grado en Química  
Nivel: Grado  
Tipo: Obligatoria  
Nº de créditos: 12 ECTS

Curvas de energía potencial para moléculas diatómicas.

Cálculo de superficies de energía potencial.

Teoría de orbitales moleculares en moléculas poliatómicas.

Espectros UV de moléculas conjugadas.

Fotofísica.

Espectroscopía de infrarrojo y Raman.

Simulación de Espectros NMR y ESR.

Caracterización fisicoquímica de polímeros (pesos moleculares, viscosidad, ...)

### 1.13. Referencias de consulta / [Course bibliography](#)

#### **Bibliografía de consulta básica (Teoría)**

ATKINS, P. W., Fisicoquímica. Omega 1999.

ATKINS, P. W. and DE PAULA, J., Elements of Physical Chemistry. Oxford University Press. 4ª Ed. 2005.

ATKINS, P. W. and DE PAULA, J., Physical Chemistry. Oxford University Press. 9ª Ed. 2010.

BERTRÁN RUSCA, J. y NÚÑEZ DELGADO, J. (Eds.), Química Física. Vol I. y II. Editorial Ariel, 2002.

BERRY, R. S., RICE, S. A. and ROSS, J., Physical Chemistry. Oxford University Press. 2ª Edición. 2000.

ENGEL, T. y REID, P., Química Física. Ed. Pearson educación S. A. 1ª Ed. 2006.

LAILER, K. J., Physical Chemistry. Houghton Mifflin Company 4ª Ed. 2003.

LEVINE, I. N., Fisicoquímica. McGraw Hill/Interamericana de España S. A. 5ª ed. 2002.

MORTIMER, R. G., Physical Chemistry. Elsevier. 3ª Ed. 2008.

#### **Bibliografía de consulta básica (Problemas y Prácticas)**

BERTRÁN, J. y NÚÑEZ, J., Problemas de Química Física. Delta Publicaciones. 2007.

HALPERN, A.M., Experimental Physical Chemistry, Prentice Hall, 1997.

LEVINE, I. N., Problemas de Fisicoquímica, McGrawHill, 2005.



Asignatura: QUÍMICA FÍSICA II  
Código: 16362  
Centro: Ciencias  
Titulación: Grado en Química  
Nivel: Grado  
Tipo: Obligatoria  
Nº de créditos: 12 ECTS

SHOEMAKER, D.P., GARLAND, C.W. and NIBLER, J.W., Experiments in Physical Chemistry, McGraw-Hill, Inc. 2008.

WILLIAMS, K. R., Error analysis in Physical and analytical Chemistry. University of Florida 1990.

### **Bibliografía de consulta especializada.**

BANWELL, C. N., Fundamentos de Espectroscopía Molecular. McGraw-Hill, 1994.

BROWN, J.M., Molecular Spectroscopy. Oxford University Press, 1998.

BRUSTOLON, M., GIAMELLO, E., Electron Paramagnetic Resonance. A Practitioners Toolkit. Wiley-VCH 2007.

CARBALLEIRA, L., PÉREZ-JUSTE, I., Problemas de Espectroscopía Molecular, Netbiblo S.L., 2008

HOLLAS, J. M., Modern Spectroscopy, John Willey & Sons 1996.

HORTA, A., Macromoléculas. Ed. UNED. 1982.

KEELER, J., Understanding NMR spectroscopy. John Wiley & Sons 2005.

LEVINE, I. N., Espectroscopía Molecular. AC 1980.

LEVINE, I. N., Química cuántica. AC 1977.

LUAÑA, V., GARCÍA FERNÁNDEZ, V. M., FRANCISCO, E. y RECIO, J.M. Espectroscopía Molecular. Serv. Pub. de la Universidad de Oviedo 2002.

REQUENA, A. y ZÚÑIGA, J., Espectroscopía. Pearson-Prentice Hall 2004.

REQUENA, A. y ZÚÑIGA, J., Química Física: Problemas de Espectroscopía. Pearson-Prentice Hall 2007.

SILLA, E. y TUÑÓN, I., Química Molecular Estadística. Editorial Síntesis S.A. 1ª ed. 2008.

## **2. Métodos docentes / Teaching methodology**

**Clases teóricas:** exposición oral por parte del profesor de los contenidos teóricos fundamentales de cada tema. En estas sesiones se utilizará la tiza y pizarra tradicional, así como material audiovisual (presentaciones, transparencias, etc) que se encontrará disponible en la página de docencia en red.

**Prácticas en el aula** (en grupo de hasta 20 estudiantes)

El seminario es el “lugar” idóneo para el desarrollo de los aspectos particulares y complementarios de la materia, donde se debe estimular la iniciativa y capacidad de trabajo personalizado del estudiante. Por otra parte puede ser también el lugar más apropiado para “conectar” la teoría con las prácticas de laboratorio.



Asignatura: QUÍMICA FÍSICA II  
Código: 16362  
Centro: Ciencias  
Titulación: Grado en Química  
Nivel: Grado  
Tipo: Obligatoria  
Nº de créditos: 12 ECTS

Las prácticas en el aula se dedicarán a tres tipos de actividad: la resolución de problemas numéricos, la discusión y desarrollo de los aspectos complementarios al desarrollo de los temas mencionados, y finalmente a la discusión de los resultados obtenidos en las prácticas de laboratorio.

Los alumnos dispondrán de un listado de ejercicios a resolver a lo largo del curso, así como de las actividades complementarias que se han de tratar, dejando una parte del tiempo para aquellos problemas y cuestiones que los propios alumnos deben ser capaces de plantear.

**Tutorías.** Además de las tutorías individuales, los profesores podrán ofertar tutorías en grupo. Estas tutorías se podrán ofertar previo acuerdo y fuera del horario de clases presenciales.

**Prácticas en el laboratorio.** En esta guía docente se incluye una serie de prácticas, con la idea de que se desarrollen en coordinación con las clases de teoría. Se pretende que el alumno realice la práctica tratando de relacionar su contenido con el de las clases teóricas, de forma que estas últimas y las prácticas constituyan dos aspectos complementarios de la misma materia.

### 3. Tiempo de trabajo del estudiante / **Student workload**

**Presencial: 150 horas**

Clases teóricas y pruebas de evaluación parcial..... 60 horas  
Prácticas en el aula..... 30 horas  
Prácticas en laboratorio..... 50 horas  
Tutorías y pruebas de evaluación semestrales..... 10 horas

**No Presencial: 150 horas**

Preparación de exámenes, seminarios prácticas en el aula, informes de prácticas, trabajos, y estudio:  
150 horas

TOTAL.....12 \* 25 = 300 horas



Asignatura: QUÍMICA FÍSICA II  
Código: 16362  
Centro: Ciencias  
Titulación: Grado en Química  
Nivel: Grado  
Tipo: Obligatoria  
Nº de créditos: 12 ECTS

#### 4. Métodos de evaluación y porcentaje en la calificación final / Evaluation procedures and weight of components in the final grade

El aprendizaje y la formación adquirida por el estudiante serán evaluados a lo largo de todo el curso, intentando que el estudiante avance de forma regular y constante en la asimilación de los contenidos de la asignatura.

##### **Convocatoria ordinaria.**

El estudiante que haya participado en menos de un 20% de las actividades de evaluación, (que realice menos de tres prácticas y no llegue a realizar ningún examen parcial), será calificado en la convocatoria ordinaria como “No evaluado”.

##### Evaluación continua mediante controles periódicos.

Se realizarán una prueba corta por semestre, de carácter individual. Esta actividad contribuirá en un 10% en la Calificación Final de la Asignatura.

##### Exámenes

En la convocatoria ordinaria se realizarán dos exámenes, al finalizar el primer y segundo semestre respectivamente. Esta actividad contribuirá en un 55% en la Calificación Final de la Asignatura. Para poder tener en cuenta las demás contribuciones a la calificación final, será necesario obtener una nota media entre los dos exámenes igual o superior a 4 (sobre 10) y una nota mínima de 3.5 en cada uno de los exámenes.

##### Evaluación de ejercicios en prácticas en el aula bajo la Tutoría del Profesor.

Esta actividad contribuirá en un 15% en la Calificación final de la Asignatura.

##### Evaluación de las Prácticas de Laboratorio

Las prácticas tienen carácter obligatorio. No obstante, para optar a una calificación de Aprobado se admitirá la omisión *justificada* de un máximo de tres prácticas de las 13 propuestas.

La calificación de las prácticas de laboratorio será de la siguiente forma: Un 40% de la calificación máxima se derivará de la realización correcta de todas ellas. Esta calificación tendrá en cuenta los resultados obtenidos y los informes de prácticas presentados. El restante 60% se obtendrá de un examen de prácticas. La calificación final de las prácticas se incorporará a la calificación final de la asignatura con una proporción del 20% de la calificación total, siendo necesario para superar la asignatura obtener una calificación mínima de 4.





Asignatura: QUÍMICA FÍSICA II  
Código: 16362  
Centro: Ciencias  
Titulación: Grado en Química  
Nivel: Grado  
Tipo: Obligatoria  
Nº de créditos: 12 ECTS

La calificación en la convocatoria ordinaria se construirá según el siguiente esquema:

TRABAJOS TUTELADOS	-----	15%
	40% Realización	
PRÁCTICAS	-----	20%
	60% Examen de Prácticas	
CONTROLES PERIÓDICOS	-----	10%
EXAMEN FINAL	-----	55%

### Convocatoria extraordinaria

Se realizará un examen final único correspondiente a los contenidos teórico-prácticos de toda la asignatura, incluyendo el examen de prácticas, que sólo deberán realizar aquellos estudiantes que las hubieran suspendido en la convocatoria ordinaria. Para superar la asignatura en esta convocatoria es necesario obtener una calificación mínima de 4 en cada uno de bloques en los que se estructura el examen.

EXAMEN FINAL	-----	70%
	40% Realización	
PRÁCTICAS	-----	20%
	60% Examen de Prácticas	
TRABAJOS TUTELADOS	-----	10%
(Convocatoria anterior)		

## 5. Cronograma\* / Course calendar

Semana Week	Contenido Contents	Horas presenciales Contact hours	Horas no presenciales Independent study time
1-15	Fundamentos de Química Cuántica y 10 sesiones de prácticas	45 25	43 30
16-26	Espectroscopía Molecular y 10 sesiones de prácticas	31 25	30 30
26-29	Termodinámica Estadística	10	8
30	Macromoléculas	4	4

\*Este cronograma tiene carácter orientativo, los horarios se publican en la Web del Grado