



## 1. DATOS GENERALES

**Asignatura:** QUÍMICA FÍSICA II: INTRODUCCIÓN A LA QUÍMICA CUÁNT**Tipología:** OBLIGATORIA**Grado:** 398 - GRADO EN QUÍMICA**Centro:** 1 - FTAD. CC. Y TECNOLOGÍAS QUÍMICAS CR.**Curso:** 2**Lengua principal de impartición:** Español**Uso docente de otras lenguas:** inglés**Página web:** Campus Virtual**Código:** 57315**Créditos ECTS:** 6**Curso académico:** 2020-21**Grupo(s):** 20 23**Duración:** C2**Segunda lengua:****English Friendly:** S**Bilingüe:** N

Profesor: <b>BEATRIZ CABAÑAS GALAN</b> - Grupo(s): 20 23				
Edificio/Despacho	Departamento	Teléfono	Correo electrónico	Horario de tutoría
Edificio Marie Curie (primer piso)	QUÍMICA FÍSICA	926052042	beatriz.cabanas@uclm.es	lunes, martes y miércoles de 10 a 13 horas
Profesor: <b>MARIA DEL PILAR MARTIN PORRERO</b> - Grupo(s): 20 23				
Edificio/Despacho	Departamento	Teléfono	Correo electrónico	Horario de tutoría
Marie Curie, 2ª planta	QUÍMICA FÍSICA	926052614	mariapilar.martin@uclm.es	Martes, miércoles a partir de las 3:30 p.m. a 5:30 p.m. y jueves y viernes desde las 12:30 p.m. a la 1:30 p.m.
Profesor: <b>LUCIA SANTOS PEINADO</b> - Grupo(s): 20 23				
Edificio/Despacho	Departamento	Teléfono	Correo electrónico	Horario de tutoría
Edificio Marie Curie/2.05	QUÍMICA FÍSICA	926052480	lucia.santos@uclm.es	Lunes y jueves 10.00h-12.00h miércoles 18h-20h

## 2. REQUISITOS PREVIOS

Es necesario haber cursado las asignaturas de Matemáticas, Física y Fundamentos de Química. Es recomendable haber aprobado dichas asignaturas en Fundamentos de Química y Física se introducen aspectos que se desarrollarán en profundidad en esta asignatura. La asignatura de Matemáticas proporcionará algunas de las herramientas de cálculo que se emplearán en el tratamiento de la Mecánica Cuántica y la Espectroscopia que se hace en la asignatura de Química Física II.

## 3. JUSTIFICACIÓN EN EL PLAN DE ESTUDIOS, RELACIÓN CON OTRAS ASIGNATURAS Y CON LA PROFESIÓN

El sentido de la asignatura es el estudio de la materia desde el punto de vista atómico- molecular con las herramientas que proporciona la mecánica cuántica y el estudio de los espectros moleculares. La asignatura pertenece al módulo II: Fundamentos de Química. Es una asignatura de carácter obligatorio de 6 créditos. Esta asignatura establece los fundamentos sobre la estructura atómica y molecular y de como obtener propiedades atómicas y moleculares que se desarrollarán con más profundidad en diferentes asignaturas del Grado en Química.

Química Física II es una asignatura importante para el futuro de los estudiantes puesto que más del 50% de PIB de EEUU y de la Unión Europea está basado en aplicaciones derivadas de la Mecánica Cuántica. Es una asignatura básica para abordar temas más complejos en el ámbito de la Química Física como el estudio de moléculas poliatómicas, reactividad química, termodinámica estadística, etc.

## 4. COMPETENCIAS DE LA TITULACIÓN QUE LA ASIGNATURA CONTRIBUYE A ALCANZAR

**Competencias propias de la asignatura**

Código	Descripción
CB01	Que los estudiantes hayan demostrado poseer y comprender conocimientos en un área de estudio que parte de la base de la educación secundaria general, y se suele encontrar a un nivel que, si bien se apoya en libros de texto avanzados, incluye también algunos aspectos que implican conocimientos procedentes de la vanguardia de su campo de estudio
CB02	Que los estudiantes sepan aplicar sus conocimientos a su trabajo o vocación de una forma profesional y posean las competencias que suelen demostrarse por medio de la elaboración y defensa de argumentos y la resolución de problemas dentro de su área de estudio
CB03	Que los estudiantes tengan la capacidad de reunir e interpretar datos relevantes (normalmente dentro de su área de estudio) para emitir juicios que incluyan una reflexión sobre temas relevantes de índole social, científica o ética
CB04	Que los estudiantes puedan transmitir información, ideas, problemas y soluciones a un público tanto especializado como no especializado
CB05	Que los estudiantes hayan desarrollado aquellas habilidades de aprendizaje necesarias para emprender estudios posteriores con un alto grado de autonomía
E08	Conocer los principios de la mecánica cuántica y su aplicación a la estructura de átomos y moléculas.
E14	Conocer y saber aplicar la metrología de los procesos químicos, incluyendo la gestión de la calidad.
E17	Desarrollar la capacidad para relacionar entre sí las distintas especialidades de la Química, así como ésta con otras disciplinas (carácter interdisciplinar).
G01	Conocer los principios y las teorías de la Química, así como las metodologías y aplicaciones características de la química analítica, química física, química inorgánica y química orgánica, entendiendo las bases físicas y matemáticas que precisan.
G02	Ser capaces de reunir e interpretar datos, información y resultados relevantes, obtener conclusiones y emitir informes razonados en problemas científicos, tecnológicos o de otros ámbitos que requieran el uso de herramientas químicas.
G04	Saber comunicar, de forma oral y escrita, los conocimientos, procedimientos y resultados de la Química, tanto a nivel especializado como no especializado.

**5. OBJETIVOS O RESULTADOS DE APRENDIZAJE ESPERADOS****Resultados de aprendizaje propios de la asignatura**

## Descripción

Capacidad para comprender y predecir el comportamiento y la reactividad de átomos y moléculas a partir de sus características estructurales, que podrán determinarse a partir de datos espectroscópicos o de cálculos químicocuánticos.

Capacidad para resolver problemas químicos aplicando las metodologías propias de la química física.

Destreza en el manejo de las principales técnicas instrumentales empleadas en química física y en la determinación experimental de las propiedades estructurales, termodinámicas y cinéticas de los sistemas químicos.

**Resultados adicionales**

- Capacidad para utilizar de forma correcta el lenguaje científico.
- Capacidad para buscar comprender y utilizar la información bibliográfica y técnica relevante.
- Desarrollar la capacidad de trabajar en equipo en los seminarios y sesiones de laboratorio.

**6. TEMARIO**

**Tema 1: ORÍGENES DE LA MECÁNICA CUÁNTICA.** La Física Teórica Clásica a finales del siglo XIX. Radiación del cuerpo negro. Hipótesis de Planck. Efecto fotoeléctrico. Efecto Compton. Espectros atómicos. Modelos atómico Bohr. Insuficiencia de este modelo. Principio de correspondencia. Dualidad onda-corpúsculo. Hipótesis de De Broglie. Principio de incertidumbre de Heisenberg. Relaciones de incertidumbre posición-momento y tiempo-energía

**Tema 2: ELEMENTOS BÁSICOS DE LA MECÁNICA CUÁNTICA.** Ecuación de onda de Schrödinger. Operador Hamiltoniano. Estados estacionarios. Interpretación de la función de onda. Reglas de construcción de los operadores cuánticos. Álgebra de operadores. Postulados de la Mecánica Cuántica. Consecuencias fundamentales de los postulados.

**Tema 3: ESTUDIO MECANOCUÁNTICO DE ALGUNOS SISTEMAS SENCILLOS CON MOVIMIENTO LINEAL.** Partícula libre. Partícula en una caja monodimensional. Números cuánticos. Energía residual en el punto cero. Partícula en una caja tridimensional. Estados degenerados. Barreras de potencial. Efecto túnel. Oscilador armónico unidimensional. Comparación de los resultados clásico y cuántico. Reducción del problema de dos partículas al problema de una partícula.

**Tema 4: MOVIMIENTO EN UN CAMPO CENTRAL.** El momento angular en Mecánica Cuántica. Coordenadas polares esféricas. Funciones y valores propios de los operadores y. Armónicos esféricos. Cuantización espacial. Campos de fuerzas centrales. Sistema de dos partículas con un potencial central. Rotor rígido. El átomo de hidrógeno como sistema de fuerzas centrales. Solución de la ecuación radial para un potencial coulombiano. Orbitales hidrogenoides. Significado físico. Representación. Funciones de distribución de probabilidad. Interacción con un campo magnético: Cuantización espacial. Spin electrónico.

**Tema 5: ATOMOS POLIELECTRÓNICOS.** Estado fundamental del átomo de He. Principio de exclusión de Pauli. Determinantes de Slater. Métodos aproximados para resolver la ecuación de Schrödinger. Método de variaciones. Teoría de perturbaciones. Comparación de ambos métodos para el estado fundamental del átomo de He. Momento angular en átomos polielectrónicos. Términos espectrales correspondientes a una configuración electrónica. Regla de Hund. Interacción spin-orbita. Acoplamiento j-j. Sistema periódico de los elementos. Principio Aufbau. Efecto Zeeman. Espectros atómicos. Reglas de selección. Estructura fina de los espectros.

**Tema 6: ESTRUCTURA ELECTRONICA DE LAS MOLECULAS DIATOMICAS.** Hamiltoniano molecular. Aproximación de Born-Oppenheimer. Molécula ion de hidrógeno. Método de Orbitales Moleculares. Aproximación OM-CLOA y aplicación a la molécula ion de hidrógeno. Tipos y simetría de OM. Curvas de energía potencial. Tratamiento de la molécula de hidrógeno mediante el método de OM. Interacción de configuraciones. Configuraciones electrónicas de moléculas diatómicas homonucleares. Diagramas de correlación. Términos electrónicos moleculares. Tratamiento de las moléculas diatómicas heteronucleares mediante el método de OM. Método de enlace de valencia.

**Tema 7: FUNDAMENTOS DE ESPECTROSCOPIA MOLECULAR.** Tratamiento simplificado de la interacción radiación-materia mediante la teoría de perturbaciones dependiente del tiempo. Probabilidad de transición. Momento dipolar de transición. Reglas de selección. Tipos de espectroscopía. Cinética de los procesos de absorción y emisión de radiación: Coeficientes de Einstein. Emisión espontánea. Tiempo de vida radiante medio. Inversión de población. Amplificación de emisión estimulada. Láseres. Forma y anchura de las líneas. Ley de Lambert-Beer.

**Tema 8: ESPECTROSCOPIAS DE ROTACION VIBRACION.** Ecuación de Schrodinger nuclear. Ecuación radial. Energía vibracional: Aproximación del oscilador armónico y correcciones de la anarmonicidad. Potencial de Morse. Energía rotacional: Aproximación del rotor rígido, acoplamiento rotación-vibración y distorsión centrífuga. Energía interna de una molécula diatómica. Estado vibracional fundamental. Energía de disociación. Espectros de rotación pura de moléculas diatómicas. Reglas de selección. Intensidades de las líneas de los espectros rotacionales. Espectros de rotación-vibración de moléculas diatómicas. Espectroscopía Raman

**Tema 9: ESPECTROSCOPIA ELECTRONICA.** Energía de los niveles electrónicos. Reglas de selección. Estructura vibracional de las transiciones electrónicas. Intensidad de las bandas vibracional es: Principio de Franck-Condon. Estructura fina rotacional de las bandas electrónico-vibracional es. Obtención de la energía de disociación. Extrapolación de Birge-Sponer. Disociación y predisociación. Fluorescencia y fosforescencia

**Tema 10: PRACTICAS DE LABORATORIO :** 1.- Representación de orbitales atómicos y moleculares con Matlab. 2.- Espectroscopía de rotación-vibración: Espectro IR de CO. 3.- Espectroscopía de emisión atómica. Espectros atómicos: Hidrogeno. Cálculo de terminos espectrales de un metal alcalino. 4- Espectro de absorción UV - visible de un colorante.

**7. ACTIVIDADES O BLOQUES DE ACTIVIDAD Y METODOLOGÍA**

Actividad formativa	Metodología	Competencias relacionadas (para títulos anteriores a RD 822/2021)	ECTS	Horas	Ev	Ob	Descripción
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL]	Método expositivo/Lección magistral	E08 G01 G02	0.8	20	N	-	Enseñanza presencial donde se impartirán los conceptos teóricos y resolución de ejercicios tipo . (G1, G2,E8 ) Se indicará al alumno los mejores recursos para la preparación de las actividades docentes desarrolladas y se animará a los mismos para que participen con sugerencias, dudas, etc.¿ que vayan surgiendo durante su trabajo en el aula o bien durante el trabajo personal que cada alumno haya realizado fuera de la misma El alumno dispondrá del material

							relacionado con la asignatura en Campus Virtual (Moodle) y en la página web de las profesoras de la asignatura. Para impartir la asignatura, se utilizarán tanto la pizarra como transparencias o presentaciones en Power Point. Elegiremos, en cada caso, aquél medio que permita al alumno aprender mejor los objetivos propuestos previamente para esta asignatura.
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA]	Trabajo autónomo	E17 G01	2.6	65	N	-	Se estudiarán los conceptos teóricos abordados en las clases magistrales y trabajara los problemas propuestos en seminarios.
Talleres o seminarios [PRESENCIAL]	Resolución de ejercicios y problemas	E08 G01 G02 G04	0.6	15	N	-	Resolución de problemas por parte del alumno, previamente planteados y guiados por el profesor.(G1, G2, G4, E8, T8)
Prácticas de laboratorio [PRESENCIAL]	Prácticas	E08 E14 E17 G02 G04 T10	0.48	12	S	S	Manejo del material de laboratorio., utilización de técnicas y operaciones básicas, obtención y análisis de resultados.(G2, G4, E8, E17, T7, T8, T10)
Resolución de problemas o casos [PRESENCIAL]	Resolución de ejercicios y problemas	CB01 E08 G01 G02	0.16	4	S	N	El estudiante resolverá de forma autónoma una serie supuestos prácticos .
Otra actividad no presencial [AUTÓNOMA]	Prácticas	T11	0.4	10	S	S	Estudio previo y elaboración de informes relacionado con las actividades practicas. Estudio posterior a la realización de las mismas
Prácticas en aulas de ordenadores [PRESENCIAL]	Prácticas	G01 G02 T10	0.12	3	S	S	Se realizara un supuesto practico empleando la metodología y el software adecuado y guiado por el profesor.
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA]	Trabajo autónomo	E08 E14 G01	0.6	15	S	N	Estudio de las pruebas de evaluación finales
Pruebas de progreso [PRESENCIAL]	Pruebas de evaluación	CB01 CB03 E08 G01 G02	0.12	3	S	N	El estudiante resolverá una serie de cuestiones y realizara ejercicios
Prueba final [PRESENCIAL]	Pruebas de evaluación	E08 G01	0.12	3	S	S	Resolucion de cuestiones teoricas y problemas de todos los temas del temario
<b>Total:</b>			<b>6</b>	<b>150</b>			
<b>Créditos totales de trabajo presencial: 2.4</b>			<b>Horas totales de trabajo presencial: 60</b>				
<b>Créditos totales de trabajo autónomo: 3.6</b>			<b>Horas totales de trabajo autónomo: 90</b>				

Ev: Actividad formativa evaluable

Ob: Actividad formativa de superación obligatoria (Será imprescindible su superación tanto en evaluación continua como no continua)

8. CRITERIOS DE EVALUACIÓN Y VALORACIONES			
Sistema de evaluación	Evaluación continua	Evaluación no continua*	Descripción
Pruebas de progreso	30.00%	0.00%	Realizar dos pruebas escritas de hora y media de duración en horario de clase para evaluar el aprendizaje de los contenidos impartidos en las clases magistrales y los seminarios
Prueba final	30.00%	80.00%	Se realizará una prueba global escrita para evaluar el aprendizaje en teoría y problemas.
Realización de prácticas en laboratorio	20.00%	20.00%	Participar activamente en las clases prácticas de laboratorio. Se valorara la destreza adquirida en el manejo de los diferentes sistemas , así como la adecuada elaboración del cuaderno del laboratorio. Y la realización de los cuestionarios propuestos para estas actividades practicas
Valoración de la participación con aprovechamiento en clase	20.00%	0.00%	Realizar una evaluación continua sobre aprendizaje basado en la resolución y exposición de los problemas propuestos, resolución de cuestionarios, así como otro tipo de actividades que se proponga.
<b>Total:</b>	<b>100.00%</b>	<b>100.00%</b>	

\* En **Evaluación no continua** se deben definir los porcentajes de evaluación según lo dispuesto en el art. 4 del Reglamento de Evaluación del Estudiante de la UCLM, que establece que debe facilitarse a los estudiantes que no puedan asistir regularmente a las actividades formativas presenciales la superación de la asignatura, teniendo derecho (art. 12.2) a ser calificado globalmente, en 2 convocatorias anuales por asignatura, una ordinaria y otra extraordinaria (evaluándose el 100% de las competencias).

**Criterios de evaluación de la convocatoria ordinaria:**

**Evaluación continua:**

El alumno tendrá en cuenta las siguientes aclaraciones:

- La superación de las dos pruebas da la opción a no tener que realizar la prueba final. Para ello será necesario superar cada una de ellas con la nota mínima de 5. Se podrán compensar siempre y cuando se tenga como mínimo un 4 en una de ellas y 7 en la otra.

- La asistencia a las sesiones de laboratorio es obligatoria. Así como la entrega de la memoria del trabajo efectuado en el laboratorio.

**Evaluación no continua:**

La prueba final contribuirá al 80 % de la nota de la asignatura y el 20 % restante lo constituirá la nota de laboratorio. La prueba final será diferente a la que se realice para la evaluación continua, ya que hay que evaluar el 100 % de las competencias.

**Particularidades de la convocatoria extraordinaria:**

En la convocatoria extraordinaria se conservará la nota obtenida en las clases practicas de laboratorio de la convocatoria ordinaria. y se realizara un examen global de la asignatura que se superará con un 5/10.

**Particularidades de la convocatoria especial de finalización:**

Se seguirá la misma metodología que para la convocatoria extraordinaria.

9. SECUENCIA DE TRABAJO, CALENDARIO, HITOS IMPORTANTES E INVERSIÓN TEMPORAL	
No asignables a temas	
Horas	Suma horas
<b>Tema 1 (de 10): ORÍGENES DE LA MECÁNICA CUÁNTICA.</b> La Física Teórica Clásica a finales del siglo XIX. Radiación del cuerpo negro. Hipótesis de Planck. Efecto fotoeléctrico. Efecto Compton. Espectros atómicos. Modelos atómico Bohr. Insuficiencia de este modelo. Principio de correspondencia. Dualidad onda-corpúsculo.Hipótesis de De Broglie. Principio de incertidumbre de Heisenberg. Relaciones de incertidumbre posición-momento y tiempo-energía	
<b>Actividades formativas</b>	<b>Horas</b>
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	2
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	4
Talleres o seminarios [PRESENCIAL][Resolución de ejercicios y problemas]	1
Pruebas de progreso [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	.11
Prueba final [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	.11
<b>Periodo temporal:</b> febrero	
<b>Tema 2 (de 10): ELEMENTOS BÁSICOS DE LA MECÁNICA CUÁNTICA..</b> Ecuación de onda de Schrödinger. Operador Hamiltoniano. Estados estacionarios. Interpretación de la función de onda. Reglas de construcción de los operadores cuánticos. Algebra de operadores. Postulados de la Mecánica Cuántica. Consecuencias fundamentales de los postulados.	
<b>Actividades formativas</b>	<b>Horas</b>
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	2
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	9
Talleres o seminarios [PRESENCIAL][Resolución de ejercicios y problemas]	1.5
Pruebas de progreso [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	.1
Prueba final [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	.1
<b>Periodo temporal:</b> febrero	
<b>Tema 3 (de 10): ESTUDIO MECANOCUÁNTICO DE ALGUNOS SISTEMAS SENCILLOS CON MOVIMIENTO LINEAL.</b> Partícula libre. Partícula en una caja monodimensional. Números cuánticos. Energía residual en el punto cero. Partícula en una caja tridimensional. Estados degenerados. Barreras de potencial. Efecto túnel. Oscilador armónico unidimensional. Comparación de los resultados clásico y cuántico. Reducción del problema de dos partículas al problema de una partícula.	
<b>Actividades formativas</b>	<b>Horas</b>
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	2
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	9
Talleres o seminarios [PRESENCIAL][Resolución de ejercicios y problemas]	1.5
Resolución de problemas o casos [PRESENCIAL][Resolución de ejercicios y problemas]	1
Pruebas de progreso [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	.3
Prueba final [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	.3
<b>Periodo temporal:</b> febrero-marzo	
<b>Tema 4 (de 10): MOVIMIENTO EN UN CAMPO CENTRAL.</b> El momento angular en Mecánica Cuántica. Coordenadas polares esféricas. Funciones y valores propios de los operadores y. Armónicos esféricos. Cuantización espacial. Campos de fuerzas centrales. Sistema de dos partículas con un potencial central. Rotor rígido. El átomo de hidrógeno como sistema de fuerzas centrales. Solución de la ecuación radial para un potencial coulombiano. Orbitales hidrogenoides. Significado físico. Representación. Funciones de distribución de probabilidad. Interacción con un campo magnético: Cuantización espacial. Spin electrónico.	
<b>Actividades formativas</b>	<b>Horas</b>
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	3
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	10
Talleres o seminarios [PRESENCIAL][Resolución de ejercicios y problemas]	3
Pruebas de progreso [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	.35
Prueba final [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	.35
<b>Periodo temporal:</b> marzo	
<b>Tema 5 (de 10): ATOMOS POLIELECTRONICOS.</b> Estado fundamental del átomo de He. Principio de exclusión de Pauli. Determinantes de Slater. Métodos aproximados para resolver la ecuación de Schrödinger. Método de variaciones. Teoría de perturbaciones. Comparación de ambos métodos para el estado fundamental del átomo de He. Momento angular en átomos polielectrónicos. Términos espectrales correspondientes a una configuración electrónica. Regla de Hund. Interacción spin-orbita. Acoplamiento j-j. Sistema periódico de los elementos. Principio Aufbau. Efecto Zeeman. Espectros atómicos. Reglas de selección. Estructura fina de los espectros.	
<b>Actividades formativas</b>	<b>Horas</b>
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	3
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	10
Talleres o seminarios [PRESENCIAL][Resolución de ejercicios y problemas]	3
Pruebas de progreso [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	.35
Prueba final [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	.35

<b>Periodo temporal:</b> marzo	
<b>Tema 6 (de 10): ESTRUCTURA ELECTRONICA DE LAS MOLECULAS DIATOMICAS.</b> Hamiltoniano molecular. Aproximación de Born-Oppenheimer. Molécula ion de hidrógeno. Método de Orbitales Moleculares. Aproximación OM-CLOA y aplicación a la molécula ion de hidrógeno. Tipos y simetría de OM. Curvas de energía potencial. Tratamiento de la molécula de hidrógeno mediante el método de OM. Interacción de configuraciones. Configuraciones electrónicas de moléculas diatómicas homonucleares. Diagramas de correlación. Términos electrónicos moleculares. Tratamiento de las moléculas diatómicas heteronucleares mediante el método de OM. Método de enlace de valencia.	
<b>Actividades formativas</b>	<b>Horas</b>
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	2
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	8
Talleres o seminarios [PRESENCIAL][Resolución de ejercicios y problemas]	2
Pruebas de progreso [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	.35
Prueba final [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	.3
<b>Periodo temporal:</b> marzo	
<b>Tema 7 (de 10): FUNDAMENTOS DE ESPECTROSCOPIA MOLECULAR.</b> Tratamiento simplificado de la interacción radiación-materia mediante la teoría de perturbaciones dependiente del tiempo. Probabilidad de transición. Momento dipolar de transición. Reglas de selección. Tipos de espectroscopía. Cinética de los procesos de absorción y emisión de radiación: Coeficientes de Einstein. Emisión espontánea. Tiempo de vida radiante medio. Inversión de población. Amplificación de emisión estimulada. Láseres. Forma y anchura de las líneas. Ley de Lambert-Beer.	
<b>Actividades formativas</b>	<b>Horas</b>
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	2
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	5
Talleres o seminarios [PRESENCIAL][Resolución de ejercicios y problemas]	1
Pruebas de progreso [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	.25
Prueba final [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	.2
<b>Periodo temporal:</b> abril	
<b>Tema 8 (de 10): ESPECTROSCOPIAS DE ROTACION VIBRACION.</b> Ecuación de Schrodinger nuclear. Ecuación radial. Energía vibracional: Aproximación del oscilador armónico y correcciones de la anarmonicidad. Potencial de Morse. Energía rotacional: Aproximación del rotor rígido, acoplamiento rotación-vibración y distorsión centrífuga. Energía interna de una molécula diatómica. Estado vibracional fundamental. Energía de disociación. Espectros de rotación pura de moléculas diatómicas. Reglas de selección. Intensidades de las líneas de los espectros rotacionales. Espectros de rotación-vibración de moléculas diatómicas. Espectroscopía Raman	
<b>Actividades formativas</b>	<b>Horas</b>
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	2
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	5
Resolución de problemas o casos [PRESENCIAL][Resolución de ejercicios y problemas]	2
Pruebas de progreso [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	.6
Prueba final [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	.6
<b>Periodo temporal:</b> abril	
<b>Tema 9 (de 10): ESPECTROSCOPIA ELECTRONICA.</b> Energía de los niveles electrónicos. Reglas de selección. Estructura vibracional de las transiciones electrónicas. Intensidad de las bandas vibracional es: Principio de Franck-Condon. Estructura fina rotacional de las bandas electrónico-vibracional es. Obtención de la energía de disociación. Extrapolación de Birge-Sponer. Disociación y predisociación. Fluorescencia y fosforescencia	
<b>Actividades formativas</b>	<b>Horas</b>
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	2
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	5
Talleres o seminarios [PRESENCIAL][Resolución de ejercicios y problemas]	2
Resolución de problemas o casos [PRESENCIAL][Resolución de ejercicios y problemas]	1
Pruebas de progreso [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	.65
Prueba final [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	.65
<b>Periodo temporal:</b> abril	
<b>Tema 10 (de 10): PRACTICAS DE LABORATORIO : 1.- Representación de orbitales atómicos y moleculares con Matlab. 2.- Espectroscopía de rotación-vibración: Espectro IR de CO. 3.- Espectroscopía de emisión atómica. Espectros atómicos: Hidrogeno. Cálculo de terminos espectrales de un metal alcalino. 4- Espectro de absorción UV - visible de un colorante.</b>	
<b>Actividades formativas</b>	<b>Horas</b>
Prácticas de laboratorio [PRESENCIAL][Prácticas]	12
Otra actividad no presencial [AUTÓNOMA][Prácticas]	10
Prácticas en aulas de ordenadores [PRESENCIAL][Prácticas]	3
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	15
<b>Actividad global</b>	
<b>Actividades formativas</b>	<b>Suma horas</b>
Talleres o seminarios [PRESENCIAL][Resolución de ejercicios y problemas]	15
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	65
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	20
Prácticas de laboratorio [PRESENCIAL][Prácticas]	12
Otra actividad no presencial [AUTÓNOMA][Prácticas]	10
Prueba final [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	2.96
Prácticas en aulas de ordenadores [PRESENCIAL][Prácticas]	3
Pruebas de progreso [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	3.06
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	15
Resolución de problemas o casos [PRESENCIAL][Resolución de ejercicios y problemas]	4
<b>Total horas: 150.02</b>	

10. BIBLIOGRAFÍA, RECURSOS						
Autor/es	Título/Enlace Web	Editorial	Población	ISBN	Año	Descripción
A, Requena y J. Zuñiga	Espectroscopia	Pearson	Madrid	84-205-3677-6.	2004	

P. Atkins, J. de Paula	Physical Chemistry 8th ed	Educación Oxford University Press	Oxford U.K	0-19-870072-5	2006	Hay diferentes ediciones
I. N. Levine ( traducción A, Requena et al.)	Química Cuántica 5 th ed.	Prentice Hall	Madrid	84-205-3096-4.	2005	
N. B . Sing	Physical Chemistry	New Age International	Nueva Delhi	9788122424034. 97881	2009	
	<a href="http://eds.b.ebscohost.com/eds/detail/detail?vid=1&amp;sid=fc96fcc9-0f40-41ac-8b90-f9ff8318d12b%40pdc-v-sessmgr03&amp;bdata=Jmxhbm9ZXMmc2l0ZT1lZHMtbi2ZQ%3d%3d#AN=307445&amp;db=nlebk">http://eds.b.ebscohost.com/eds/detail/detail?vid=1&amp;sid=fc96fcc9-0f40-41ac-8b90-f9ff8318d12b%40pdc-v-sessmgr03&amp;bdata=Jmxhbm9ZXMmc2l0ZT1lZHMtbi2ZQ%3d%3d#AN=307445&amp;db=nlebk</a>					
A. Requena y J. Zúñiga	Química Física: Problemas de Espectroscopia	Prentice Hall	Madrid	8483223678	2007	
I.N. Levine	Problemas de Fisico Química	Mc Graw Hill		84-481-9833-6	2005	
I.N. Levine, Vol. 2	Fisicoquímica	McGraw-Hill	Madrid	84448106172	2004	
J . Bertrán Rusca y col	Química Cuántica	Sintesis	Madrid	84-7738-742-7	2002	
L.E. Bailey y M:D.Troitioño	la Química Cuántica en 100 problemas.	UNED	Madrid	9788476654637	2004	
P.W. Atkins	Fisicoquímica	Panamerica	Madrid	9789500612487	2008	
G. R. Mortimer	Physical Chemistry	Academic Press	San Diego USA	9780125083454. 97800	2000	