



1. DATOS GENERALES

Asignatura: QUÍMICA FÍSICA II: INTRODUCCIÓN A LA QUÍMICA CUÁNT**Tipología:** OBLIGATORIA**Grado:** 409 - GRADO EN QUÍMICA**Centro:** 1 - FACULTAD CC. Y TECNOLOGÍAS QUÍMICAS CR**Curso:** 2**Lengua principal de impartición:** Español**Uso docente de otras lenguas:****Página web:** Campus Virtual**Código:** 57315**Créditos ECTS:** 6**Curso académico:** 2021-22**Grupo(s):** 20 23**Duración:** C2**Segunda lengua:****English Friendly:** S**Bilingüe:** N

Profesor: BEATRIZ CABAÑAS GALAN - Grupo(s): 20 23				
Edificio/Despacho	Departamento	Teléfono	Correo electrónico	Horario de tutoría
Edificio Marie Curie (primer piso)	QUÍMICA FÍSICA	6239	beatriz.cabanas@uclm.es	De lunes a viernes de 10 a 12 h
Profesor: MARIA DEL PILAR MARTIN PORRERO - Grupo(s): 20 23				
Edificio/Despacho	Departamento	Teléfono	Correo electrónico	Horario de tutoría
Marie Curie, 2ª planta	QUÍMICA FÍSICA	3486	mariapilar.martin@uclm.es	Lunes, miércoles, viernes de 10 a 12. Martes y jueves de 16 a 17
Profesor: LUCIA SANTOS PEINADO - Grupo(s): 20 23				
Edificio/Despacho	Departamento	Teléfono	Correo electrónico	Horario de tutoría
Edificio Marie Curie/2.05	QUÍMICA FÍSICA	3454	lucia.santos@uclm.es	Lunes, miércoles, viernes de 10 a 12. Martes y jueves de 16 a 17

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 desarrollan 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 cómo 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.
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.
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.
E15	Saber manejar la instrumentación química estándar y ser capaz de elaborar y gestionar procedimientos normalizados de trabajo en el laboratorio e industria química.
E16	Planificar, diseñar y desarrollar proyectos y experimentos.
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.
T10	Capacidad de utilización de software específico para química a nivel de usuario.
T11	Capacidad de obtener información bibliográfica, incluyendo recursos en Internet.

5. OBJETIVOS O RESULTADOS DE APRENDIZAJE ESPERADOS

Resultados de aprendizaje propios de la asignatura

Descripción

Capacidad para buscar, comprender y utilizar de la información bibliográfica y técnica relevante.

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.

Capacidad para utilizar de forma correcta el lenguaje científico.

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: ORIGENES 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-córpúsculo. 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 POLIELECTRONICOS. 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 vibracionales: Principio de Franck-Condon. Estructura fina rotacional de las bandas electrónico-vibracionales. Obtención de la energía de disociación. Extrapolación de Birge-Sponer. Disociación y predisiociación. 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	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
Total:			6	150			
Créditos totales de trabajo presencial: 2.4			Horas totales de trabajo presencial: 60				
Créditos totales de trabajo autónomo: 3.6			Horas totales de trabajo autónomo: 90				

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. Examen con cuestiones y problemas sobre los contenidos impartidos en la asignatura. Será de 60 % cuando la prueba implique la evaluación de todo el temario de la asignatura en EC o del 80 % en ENC
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.
Total:	100.00%	100.00%	

* En **Evaluación no continua** se deben definir los porcentajes de evaluación según lo dispuesto en el art. 6 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. 13.2) 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:

1. Examen escrito con cuestiones y problemas sobre los contenidos impartidos en la asignatura (60 % de la nota). Este porcentaje puede repartirse en dos exámenes parciales (prueba de progreso y prueba final) o en un examen final (prueba final).
2. Evaluación continua de trabajo en laboratorio (10%) incluyendo la adecuada elaboración de la memoria de de resultados y las cuestiones tipo test(10%).
3. Evaluación continua sobre aprendizaje basado en la resolución de problemas en las horas de seminario(20%). Se pedirá al alumno entregar ejercicios resueltos, resolver diferentes cuestiones relacionadas con la materia, resolución de casos prácticos...
4. Para aplicar la evaluación continua deben tener al menos un 4 en las actividades formativas evaluables.
- 5- No podrá superarse la asignatura si no se realizan las prácticas de laboratorio. Son obligatorias
- 6- Para superar la asignatura es necesario obtener una calificación mínima de 5 una vez aplicados todos los porcentajes de evaluación correspondientes a cada actividad

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. 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
Tema 1 (de 10): 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	
Actividades formativas	Horas
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
Periodo temporal: febrero	
Tema 2 (de 10): 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. Algebra de operadores. Postulados de la Mecánica Cuántica. Consecuencias fundamentales de los postulados.	
Actividades formativas	Horas
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
Periodo temporal: febrero	
Tema 3 (de 10): 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.	
Actividades formativas	Horas
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
Periodo temporal: febrero-marzo	
Tema 4 (de 10): 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.	
Actividades formativas	Horas
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
Periodo temporal: marzo	
Tema 5 (de 10): ATOMOS POLIELECTRONICOS. 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.	

Actividades formativas	Horas
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	
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
Periodo temporal: marzo	
Tema 6 (de 10): ESTRUCTURA ELELCTRONICA 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.	
Actividades formativas	Horas
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
Periodo temporal: marzo	
Tema 7 (de 10): 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.	
Actividades formativas	Horas
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
Periodo temporal: abril	
Tema 8 (de 10): 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	
Actividades formativas	Horas
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
Periodo temporal: abril	
Tema 9 (de 10): 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	
Actividades formativas	Horas
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
Periodo temporal: abril	
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.	
Actividades formativas	Horas
Talleres o seminarios [PRESENCIAL][Resolución de ejercicios y problemas]	12
Otra actividad no presencial [AUTÓNOMA][Prácticas]	10
Prácticas en aulas de ordenadores [PRESENCIAL][Prácticas]	3
Prácticas en aulas de ordenadores [PRESENCIAL][Prácticas]	15
Actividad global	Suma horas
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
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
Resolución de problemas o casos [PRESENCIAL][Resolución de ejercicios y problemas]	4
Total horas: 123.02	

10. BIBLIOGRAFÍA, RECURSOS

Autor/es	Título/Enlace Web	Editorial	Población	ISBN	Año	Descripción
A, Requena y J. Zuñiga	Espectroscopia	Pearson Educación	Madrid	84-205-3677-6.	2004	
P. Atkins, J. de Paula	Physical Chemistry 8th ed	Oxford University Press	Oxford U.K	0-19-870072-5	2006	Hay diferentes ediciones
I. N. Levine (traducción A, Requena et al.)	Química Cuantica 5 th ed.	Prentice Hall	Madrid	84-205-3096-4.	2005	
N. B . Sing	Physical Chemistry	New Age International	Nueva Delhi	9788122424034. 97881	2009	
	http://eds.b.ebscohost.com/eds/detail/detail?vid=1&sid=fc96fcc9-0f40-41ac-8b90-f9ff8318d12b%40pdc-v-sessmgr03&bdata=Jmxhbmc9ZXMmc2l0ZT1lZHMtbGl2ZQ%3d%3d#AN=307445&db=nlebk					
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.Troitño	la Química Cuantica 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	