UNIVERSIDAD DE CASTILLA - LA MANCHA

GUÍA DOCENTE

1. DATOS GENERALES

Asignatura: QUÍMICA FÍSICA II: INTRODUCCIÓN A LA QUÍMICA CUÁNT
Código: 57315
Tipología: OBLIGATORIA
Créditos ECTS: 6
Grado: 409 - GRADO EN QUÍMICA (2021)
Curso académico: 2023-24
Centro: 1 - FTAD. CC. Y TECNOLOGIAS QUIMICAS CR.
Grupo(s): 20 23
Curso: 2
Duración: C2
Lengua principal de impartición: Español
Segunda lengua:
Uso docente de otras lenguas:
English Friendly: S
Página web: Campus Virtual
Bilingüe: N

Profesor: **BERNABE BALLESTEROS RUIZ** - Grupo(s): **20 23**

Edificio/Despacho	Departamento	Teléfono	Correo electrónico	Horario de tutoría
Marie Curie, primera planta	QUÍMICA FÍSICA	926052049	bernabe.ballesteros@uclm.es	L, M: 9-11h J: 17-19h

Profesor: **BEATRIZ CABAÑAS GALAN** - 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 y martes de 16 a 18h ; miércoles y jueves de 12 a 13 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	926052614	mariapilar.martin@uclm.es	Lunes de 11 a 13h; miércoles y jueves de 16 a 18h.

Profesor: **LUCIA SANTOS PEINADO** - Grupo(s): **20 23**

Edificio/Despacho	Departamento	Teléfono	Correo electrónico	Horario de tutoría
Edifico Marie Curie/2.05	QUÍMICA FÍSICA	926052480	lucia.santos@uclm.es	Lunes, miércoles y jueves de 16 a 18h

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 Quimia y Física se introducen aspectos que se desarrllaran en profundidad en esta asignatura.La asignatura de Matematicas proporcionará algunas de las herramientas de calculo que se emplearan en el tratamiento de la Mecanica Cuantica y la Espectroscopia que se hace en la asignatura de Quimica Fisica 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 modulo II: Fundamentos de Química. Es un 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 desarrollaran con mas profundidad en diferntes asignaturas del Grado en Química.

Química Física II es una asignatura importante para el futuro de los estudiantes puesto que mas del 50% de PIB de EEUU y de la Unión Europea esta 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: INTRODUCCIÓN Y POSTULADOS DE LA MECÁNICA CUÁNTICA.

Tema 1.1 ORIGENES DE LA MECANICA CUANTICA. 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. Dualidad onda-corpúsculo. Hipótesis de De Broglie. Principio de incertidumbre de Heisenberg. Relaciones de incertidumbre posición-momento y tiempo-energía

Tema 1.2 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. Algebra de operadores. Postulados de la Mecánica Cuántica. Consecuencias fundamentales de los postulados

Tema 2: 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 3: MOMENTO ANGULAR Y MOVIMIENTO DE ROTACIÓN. El momento angular en Mecánica Cuántica. Coordenadas polares esféricas. Funciones y valores propios de los operadores. Armónicos esféricos. Cuantización espacial. Campos de fuerzas centrales. Sistema de dos partículas con un potencial central. Rotor rígido.

Tema 4: EL ÁTOMO DE HIDRÓGENO. El átomo de hidrógeno como sistema de fuerzas centrales. Solución de la ecuación radial para un potencial culombiano. Orbitales hidrogenoides. Significado físico. Representación. Funciones de distribución de probabilidad. Interacción con un campo magnético: Cuantización espacial. Efecto Zeeman.Spin electrónico.

Tema 5: ÁTOMOS 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 polieelectrónicos. Términos espectrales correspondientes a una configuración electrónica. Regla de Hund. Interacción spin-orbita. Acoplamiento j-j. Sistema periódico de los elementos. Principio Aufbau. 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. Configuraciones electrónicas de moléculas diatómicas homonucleares. Términos electrónicos moleculares. Tratamiento de las moléculas diatómicas heteronucleares mediante el método de OM. Método de enlace de valencia.

Tema 7: INTRODUCCIÓN A LA ESPECTROSCOPIA MOLECULAR.

Tema 7.1 FUNDAMENTOS. 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. Forma y anchura de las líneas. Ley de Lambert-Beer. Inversión de población. Amplificación de emisión estimulada. Láseres.

Tema 7.2 ESPECTROSCOPIA DE ROTACION Y VIBRACION. Ecuación de Schrodinger nuclear. Ecuación radial.Energía vibracional: Aproxi-mación 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 8: PRACTICAS DE LABORATORIO : 1.- Representación de orbitales atómicos y moleculares con Matlab. 2.- Espectrocopía 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 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

Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL]	Método expositivo/Lección magistral	E08 G01 G02	0.8	20	N	-	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 trabajará los problemas propuestos en seminarios.
Talleres o seminarios [PRESENCIAL]	Resolución de ejercicios y problemas	E08 G01 G02 G04	0.56	14	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	0.6	15	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 una serie de ejercicios y 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
Prueba parcial [PRESENCIAL]	Pruebas de evaluación	CB01 CB03 E08 G01 G02	0.06	1.5	S	N	El profesor planteará un supuesto práctico y un cuestionario tipo test
Prueba final [PRESENCIAL]	Pruebas de evaluación	E08 G01	0.1	2.5	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	Evaluacion continua	Evaluación no continua*	Descripción
Pruebas parciales	30.00%	0.00%	Prueba escrita para evaluar el grado de aprendizaje de los contenidos impartidos correspondientes a los 4 primeros temas .
Prueba final	30.00%	80.00%	Se realizará una prueba global escrita para evaluar el aprendizaje de los conceptos teóricos y de la parte prácticas con la resolución correcta de casos prácticos. 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 valorará la destreza adquirida en el manejo de las diferentes técnicas analíticas o software, así como la adecuada elaboración del cuaderno del laboratorio/memoria y la realización de los cuestionarios tipo test propuestos para estas actividades prácticas antes y después de la práctica.
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. 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:

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 parcial 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 con la presentación de los 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 8): INTRODUCCIÓN Y POSTULADOS DE LA MECÁNICA CUÁNTICA.

Actividades formativas	**Horas**
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	4
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	4
Talleres o seminarios [PRESENCIAL][Resolución de ejercicios y problemas]	2
Otra actividad no presencial [AUTÓNOMA][Prácticas]	1.25
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	1.9
Prueba parcial [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	.21
Prueba final [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	.36

Periodo temporal: febrero

Tema 2 (de 8): 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
Otra actividad no presencial [AUTÓNOMA][Prácticas]	1.25
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	1.9
Prueba parcial [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	.21
Prueba final [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	.36

Periodo temporal: febrero

Tema 3 (de 8): MOMENTO ANGULAR Y MOVIMIENTO DE ROTACIÓN. El momento angular en Mecánica Cuántica. Coordenadas polares esféricas. Funciones y valores propios de los operadores. Armónicos esféricos. Cuantización espacial. Campos de fuerzas centrales. Sistema de dos partículas con un potencial central. Rotor rígido.

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
Resolución de problemas o casos [PRESENCIAL][Resolución de ejercicios y problemas]	1
Otra actividad no presencial [AUTÓNOMA][Prácticas]	1.25
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	1.9
Prueba parcial [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	.21
Prueba final [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	.36

Periodo temporal: febrero

Tema 4 (de 8): EL ÁTOMO DE HIDRÓGENO. El átomo de hidrógeno como sistema de fuerzas centrales. Solución de la ecuación radial para un potencial culombiano. Orbitales hidrogenoides. Significado físico. Representación. Funciones de distribución de probabilidad. Interacción con un campo magnético: Cuantización espacial. Efecto Zeeman.Spin electrónico.

Actividades formativas	**Horas**
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	4
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	11
Talleres o seminarios [PRESENCIAL][Resolución de ejercicios y problemas]	3
Resolución de problemas o casos [PRESENCIAL][Resolución de ejercicios y problemas]	1
Otra actividad no presencial [AUTÓNOMA][Prácticas]	1.25
Prácticas en aulas de ordenadores [PRESENCIAL][Prácticas]	3

Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	1.9
Prueba parcial [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	.21
Prueba final [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	.36
Periodo temporal: marzo	

Tema 5 (de 8): ÁTOMOS 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 polieelectrónicos. Términos espectrales correspondientes a una configuración electrónica. Regla de Hund. Interacción spin-orbita. Acoplamiento j-j. Sistema periódico de los elementos. Principio Aufbau. Espectros atómicos. Reglas de selección. Estructura fina de los espectros.

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]	2.5
Otra actividad no presencial [AUTÓNOMA][Prácticas]	1.25
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	1.9
Prueba parcial [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	.21
Prueba final [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	.36
Periodo temporal: marzo	

Tema 6 (de 8): 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. Configuraciones electrónicas de moléculas diatómicas homonucleares. 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]	5
Talleres o seminarios [PRESENCIAL][Resolución de ejercicios y problemas]	2
Resolución de problemas o casos [PRESENCIAL][Resolución de ejercicios y problemas]	1
Otra actividad no presencial [AUTÓNOMA][Prácticas]	1.25
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	1.9
Prueba parcial [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	.21
Prueba final [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	.36
Periodo temporal: marzo-abril	

Tema 7 (de 8): INTRODUCCIÓN A LA ESPECTROSCOPIA MOLECULAR.

Actividades formativas	**Horas**
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	4
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	12
Talleres o seminarios [PRESENCIAL][Resolución de ejercicios y problemas]	2
Resolución de problemas o casos [PRESENCIAL][Resolución de ejercicios y problemas]	1
Otra actividad no presencial [AUTÓNOMA][Prácticas]	1.25
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	1.9
Prueba parcial [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	.24
Prueba final [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	.34
Periodo temporal: abril-mayo	

Tema 8 (de 8): PRACTICAS DE LABORATORIO : 1.- Representación de orbitales atómicos y moleculares con Matlab. 2.- Espectrocopía 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**
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	10
Prácticas de laboratorio [PRESENCIAL][Prácticas]	15
Otra actividad no presencial [AUTÓNOMA][Prácticas]	1.25
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	1.7
Periodo temporal: febrero-marzo	

Actividad global

Actividades formativas	**Suma horas**
Talleres o seminarios [PRESENCIAL][Resolución de ejercicios y problemas]	14
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	65
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL][Método expositivo/Lección magistral]	20
Prácticas de laboratorio [PRESENCIAL][Prácticas]	15
Otra actividad no presencial [AUTÓNOMA][Prácticas]	10
Prueba final [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	2.5
Prácticas en aulas de ordenadores [PRESENCIAL][Prácticas]	3
Prueba parcial [PRESENCIAL][Pruebas de evaluación]	1.5
Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA][Trabajo autónomo]	15
Resolución de problemas o casos [PRESENCIAL][Resolución de ejercicios y problemas]	4
Total horas:	150

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	
		Oxford				

P. Atkins, J. de Paula	Physical Chemistry 8th ed	University Press	Oxford U.K	0-19-870072-5	2006	Hay diferentes ediciones
I. N. Levine (traduccion A, Requena et al.)	Quimica 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.Troitiño	la Quimica 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	