

QUÍMICA FÍSICA AVANZADA II

CÓDIGO: 7441

Carga docente: 6,5 créditos teóricos y 2 créditos prácticos
Curso: 4º, 2º cuatrimestre

Departamento: Química Física

Profesora responsable: M^a Paz Galache Payá

OBJETIVOS

El objetivo principal de la asignatura es el estudio de la interacción de la radiación con la materia y el análisis de los espectros obtenidos como resultado de dicha interacción.

PROGRAMA DE TEORÍA

- Tema 1. REPASO DE QUÍMICA CUÁNTICA
- Tema 2. SIMETRÍA MOLECULAR
- Tema 3. INTERACCIÓN MATERIA RADIACIÓN
- Tema 4. ESPECTROS DE ROTACIÓN DE MOLÉCULAS DIATÓMICAS.
- Tema 5. ESPECTROS DE ROTACIÓN DE MOLÉCULAS POLIATÓMICAS.
- Tema 6. ESPECTROS DE VIBRACIÓN DE MOLÉCULAS DIATÓMICAS.
- Tema 7. ESPECTROS DE VIBRACIÓN DE MOLÉCULAS POLIATÓMICAS.
- Tema 8. ESPECTROS ELECTRÓNICOS DE MOLÉCULAS DIATÓMICAS.
- Tema 9. ESPECTROS ELECTRÓNICOS DE MOLÉCULAS POLIATÓMICAS.
- Tema 10. ESPECTROS DE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR.

PROGRAMA DE PRÁCTICAS

- Práctica 1. ESPECTROS DE MICROONDAS, INFRARROJO Y RAMAN DE MOLÉCULAS DIATÓMICAS.
- Práctica 2. ESPECTROS DE MICROONDAS E INFRARROJO DE MOLÉCULAS POLIATÓMICAS.
- Práctica 3. ESPECTROS VISIBLE ULTRAVIOLETA DE MOLÉCULAS DIATÓMICAS Y POLIATÓMICAS.
- Práctica 4. TEORÍA DE GRUPOS.
- Práctica 5. COMPROBACIÓN DE LA LEY DE LAMBERT-BEER.
- Práctica 6. DETERMINACIÓN DE ESPECTROS DE ABSORCIÓN ELECTRÓNICA DE COMPUESTOS CON GRUPO CARBONILO.
- Práctica 7. ESPECTRO INFRARROJO DEL BENCENO.

CONTENIDOS DETALLADOS**TEMA 1. REPASO DE QUÍMICA CUÁNTICA.**

Postulados.- Consecuencias de los postulados.- Operador momento angular.- Operador hamiltoniano.- Métodos aproximados.- Separación de movimientos moleculares.

TEMA 2. SIMETRÍA MOLECULAR.

Elementos y operaciones de simetría.- Grupos puntuales de simetría.- Representación de grupos.- Tabla de caracteres.- Descomposición de una representación reducible en representaciones irreducibles.- La representación correspondiente al espacio de configuración.- La representación correspondiente a un conjunto de funciones.- Teoría de Grupos y Mecánica Cuántica.

QUÍMICA FÍSICA AVANZADA II

TEMA 3. INTERACCIÓN MATERIA RADIACIÓN.

Concepto de espectroscopía.- Teoría de perturbaciones para procesos dependientes del tiempo.- Interacción de la radiación electromagnética con un sistema molecular.- Probabilidades de transición de Einstein.- Reglas de selección.- Forma y anchura de las líneas.- Comparación con los datos experimentales.

TEMA 4. ESPECTROS DE ROTACIÓN DE MOLÉCULAS DIATÓMICAS.

Energía de rotación: rotor rígido mecanocuántico.- Espectro de rotación en la región de microondas: reglas de selección y población de los niveles de rotación.- Rotor no rígido y distorsión centrífuga.- Efecto Stark.- Polarizabilidad molecular y efecto Raman.- Espectro Raman de rotación.

TEMA 5. ESPECTROS DE ROTACIÓN DE MOLÉCULAS POLIATÓMICAS.

Rotación en moléculas poliatómicas, el tensor de inercia.- Operador hamiltoniano de rotación.- Espectro de rotación en la región de microondas de moléculas lineales.- Moléculas trompoesféricas.- Trompos simétricos.- Trompos asimétricos.- Espectro Raman de rotación.- Determinación de estructuras moleculares: sustitución isotópica.

TEMA 6. ESPECTROS DE VIBRACIÓN DE MOLÉCULAS DIATÓMICAS.

Funciones de energía potencial para moléculas diatómicas.- Vibración de moléculas diatómicas: el oscilador armónico.- Espectro de vibración pura en la región infrarroja: reglas de selección y población de los niveles de vibración.- Anarmonicidad.- Espectro de vibración en la región infrarroja: banda fundamental, sobretonos y bandas calientes.- Acoplamiento rotación-vibración: el rotor vibrante, espectro infrarrojo.- Espectro Raman de rotación-vibración.

TEMA 7. ESPECTROS DE VIBRACIÓN DE MOLÉCULAS POLIATÓMICAS.

Tratamiento clásico de la vibración de moléculas poliatómicas: modos y coordenadas normales.- Tratamiento cuántico de la vibración, niveles degenerados y reglas de selección.- Clasificación y actividad de las coordenadas normales en la región infrarroja.- Sobretonos y combinaciones.- Frecuencias características.- Espectros Raman de vibración.- Modos normales de vibración activos en Raman.- Coordenadas internas.- Función potencial cuadrática y campos de fuerza aproximados.- Determinación de constantes de fuerza.

TEMA 8. ESPECTROS ELECTRÓNICOS DE MOLÉCULAS DIATÓMICAS.

Energía de los estados electrónicos.- Notación de los estados electrónicos.- Reglas de selección para transiciones electrónicas.- Espectros electrónicos.- Estructura fina de vibración de las bandas electrónicas: Principio de Frank-Condon y disociación.

TEMA 9. ESPECTROS ELECTRÓNICOS DE MOLÉCULAS POLIATÓMICAS.

Energía de los estados electrónicos.- Notación de los estados electrónicos.- Transiciones electrónicas: Reglas de selección.- Frecuencias características.- Transiciones electrónicas en sistemas conjugados

TEMA 10. ESPECTROS DE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR.

Fundamentos.- Momento angular de espín nuclear.- Transiciones de espín nuclear.- Interacción molécula/campo magnético.- Desplazamiento químico.- Constante de acoplamiento espín-espín.- Equivalencia magnética.- Desacoplamiento.- Espectro de RMN.- Relación parámetros magnéticos/estructura molecular.

QUÍMICA FÍSICA AVANZADA II

METODOLOGÍA DOCENTE

El desarrollo de la asignatura se estructura en clases teóricas y prácticas.

Las clases teóricas consisten en la exposición sucesiva de los temas reseñados en el programa de la asignatura. Conforme el desarrollo de la materia lo requiera, se van intercalando los problemas y ejercicios necesarios para una mejor comprensión de la misma. Las exposiciones se apoyan en presentaciones que están publicadas como materiales de esta asignatura en el Campus Virtual de la Universidad de Alicante.

Las clases prácticas se dividen en prácticas experimentales en laboratorio y simulaciones mediante ordenador.

CRITERIOS DE EVALUACIÓN

Evaluación ordinaria

Por esta vía el alumno opta por que sus conocimientos sean evaluados de forma continua según los siguientes criterios:

Criterios de evaluación de la parte teórica:

- 1) Para la evaluación de la teoría de esta asignatura se realizará un examen final por convocatoria. En dicho examen, figurarán las puntuaciones de cada pregunta. Si ésta consta de varios apartados, a menos que se especifique lo contrario, cada uno de ellos puntuará proporcionalmente a la nota global de la pregunta.
- 2) Para aprobar se deberá obtener una nota ≥ 5 en el examen final de la materia.
- 3) El aprobado de la parte teórica se conservará hasta la convocatoria de diciembre del año en curso.
- 4) La presentación al examen teórico supondrá el consumo de la convocatoria correspondiente.

Criterios de evaluación de la parte práctica:

Para superar las prácticas de la asignatura se distinguirá entre dos supuestos:

A) Alumnos que nunca han realizado las prácticas de la asignatura:

- 1) Para superar las prácticas la asistencia es obligatoria. Sólo se admitirá un máximo de dos faltas justificadas que se deberán recuperar durante el período de prácticas.
- 2) Con respecto a las prácticas experimentales, cada pareja entregará, al término del período de prácticas y dentro del plazo establecido, un informe completo y detallado de las mismas. El profesor responsable de las prácticas fijará el plazo de entrega de los informes y lo publicará en el Campus Virtual. Los informes de prácticas deberán constar de: a) introducción teórica, b) objetivos, c) procedimiento, d) resultados, e) conclusiones y f) bibliografía.
- 3) Con respecto a las simulaciones mediante ordenador, cada pareja de prácticas deberá entregar, inmediatamente después de su realización, las hojas de resultados debidamente rellenas.
- 4) Para la evaluación de las prácticas se realizará un examen final por convocatoria. La fecha de este examen se comunicará con la debida antelación y se publicará en el Campus Virtual.
- 5) La calificación de las prácticas se obtendrá promediando la nota de este examen con las calificaciones obtenidas en los informes presentados.
- 6) Para aprobar se deberá obtener una nota ≥ 5 .

QUÍMICA FÍSICA AVANZADA II

- 7) El aprobado de la parte práctica se mantendrá hasta la convocatoria de diciembre del año en curso.

B) Alumnos que ya han realizado las prácticas de la asignatura:

Estos alumnos dispondrán de dos vías para aprobar las prácticas: a) Asistir al laboratorio, y seguir los mecanismos descritos en el supuesto **A)**; b) Presentarse directamente al examen de prácticas y obtener una calificación ≥ 5 en el mismo.

Criterios de evaluación globales:

- 1) Las calificaciones de la parte teórica y de la parte práctica supondrán el 80 y el 20% de la nota final, respectivamente.
- 2) Para poder aprobar la asignatura será necesario que la puntuación global obtenida sea mayor o igual a 5.

Evaluación extraordinaria

Para alumnos que no hayan asistido al laboratorio se realizará un examen final extraordinario. Este examen constará de tres partes: una parte teórica, una parte de problemas y otra parte de prácticas de laboratorio. Las tres partes contribuirán, respectivamente, con un 50, 30 y 20% a la nota final.

BIBLIOGRAFIA

- “Espectroscopía Molecular”, I.N. Levine, AC
“Modern Spectroscopy”, J.M. Hollas, Wiley & Sons Ltd.
“Chemical applications of Group Theory” F.A. Cotton, , Wiley & Sons Ltd.
“Problemas resueltos de Química Cuántica y Espectroscopía Molecular”, J.M. Pérez, A.L. Esteban y M.P. Galache, Publicaciones de la Universidad de Alicante.
“Química Física”, J. Bertran y J. Nuñez, Ed. Ariel S.A., Barcelona.
“Espectroscopia”, A. Requena y J. Zúñiga, Prentice Hall.