



Asignatura:  
Código:  
Grupo:  
Titulación:  
Profesor/a:  
Curso Académico:

## 1. ASIGNATURA / COURSE

### 1.1. Nombre / Course Title

APLICACIONES DE LA QUÍMICA CUANTICA / QUANTUM CHEMISTRY APPLICATIONS

### 1.2. Código / Course Code

12700

### 1.3. Tipo / Type of course

Troncal / Compulsory

### 1.4. Nivel / Level of course

Grado / Grade

### 1.5. Curso / Year of course

Tercero / Third course

### 1.6. Semestre / Semester

1º

### 1.7. Número de créditos / Number of Credits Allocated

4 LRU

### 1.8. Requisitos Previos / Prerequisites

Es necesario haber aprobado las asignaturas “Fundamentos de Química Cuántica” y “Química Física” del Primer Ciclo. Además se recomienda haber aprobado las siguientes asignaturas del Primer Ciclo: Cálculo, Mecánica, y Electromagnetismo y óptica.

### 1.9. ¿ Es obligatoria la asistencia ? / Is attendance to class mandatory?

SI / Yes



Asignatura:  
Código:  
Grupo:  
Titulación:  
Profesor/a:  
Curso Académico:

## 1.10. Datos del profesor/a / profesores / Faculty Data

### Grupo: 31

Manuel Yañez

Departamento: Química  
Facultad de Ciencias, Despacho C-IX, 607  
Teléfono: 91 497 4953  
e-mail: Correo electrónico: [manuel.yanez@uam.es](mailto:manuel.yanez@uam.es)  
Página Web:  
Horario de Tutorías Generales:

### Grupo: 36

José Manuel García  
de la Vega

Departamento: Química Física Aplicada  
Facultad: Ciencias Módulo C-XIV  
Teléfono:  
e-mail:  
Página Web:  
Horario de Tutorías Generales:

## 1.11. OBJETIVOS DEL CURSO / OBJECTIVE OF THE COURSE

### OBJETIVOS

El objetivo general de la asignatura es la aplicación de la Química Cuántica a la Espectroscopia. Para ello se introduce al alumno en el concepto de interacción entre la radiación electromagnética y la materia para, posteriormente, detenerse en el estudio de diversos tipos de espectroscopias: microondas (rotación molecular), infrarrojo (vibración molecular), ultravioleta y visible (transiciones electrónicas). Cada una de ellas se estudia tanto desde el punto de vista teórico como de sus aplicaciones para la obtención de la información estructural a que da lugar. El alumno deberá ser capaz de analizar tanto un espectro de microondas, como de infrarrojo o electrónico. Deberá poder extraer de este análisis toda la información pertinente sobre la estructura y las características de enlace de la molécula. Igualmente deberá estar en condiciones de simular las diferentes regiones de un espectro molecular a partir de datos estructurales y de enlace extraídos de la literatura.



Asignatura:  
Código:  
Grupo:  
Titulación:  
Profesor/a:  
Curso Académico:

### **COMPETENCIAS: Adquisición de conocimientos.**

A la conclusión de la asignatura, el alumno deberá tener un conocimiento fundamentado de las condiciones en las que se da una interacción entre la luz y los compuestos moleculares, del origen de las bandas de absorción y sus características en las regiones del espectro antes mencionadas, así como de las reglas de selección que gobiernan las transiciones. Deberá haber alcanzado un buen conocimiento específico sobre las espectroscopias de microondas, infrarrojo y ultravioleta-visible.

### **Adquisición de competencias y destrezas.**

El desarrollo de la asignatura debe promover la capacidad del alumno:

- para buscar información bibliográfica sobre aspectos de la misma, tanto en la bibliografía que se le propone como a través de la red.
- para debatir durante los seminarios sobre las cuestiones planteadas
- para expresar por escrito sus ideas y para manejar con corrección los conceptos y la terminología que son propias de esta materia.
- para resolver problemas numéricos
- para trabajar en grupo

## **1.12. Contenidos del Programa / Course Contents**

### **BLOQUE I:**

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

### **BLOQUE II:**

Movimiento nuclear: Separación rotación-vibración. Moléculas diatómicas. Rotación: aproximación del rotor rígido, niveles de energía, reglas de selección, distribución de poblaciones y sustitución isotópica. Distorsión centrífuga. Vibración: oscilador lineal armónico, niveles de energía y reglas de selección. Oscilador anarmónico. Acoplamiento vibración-rotación. Espectro electrónico: términos espectroscópicos, principio de Franck-Condon, energía de disociación, estructura vibracional y estructura rotacional. Predisociación.



Asignatura:  
Código:  
Grupo:  
Titulación:  
Profesor/a:  
Curso Académico:

### BLOQUE III:

Moléculas poliatómicas. Rotación: momentos principales de inercia, moléculas lineales, trompoesféricas, tromposimétricas y trompoasimétricas. Niveles de energía y reglas de selección. Vibración: coordenadas internas y modos normales de vibración. Espectro vibracional de moléculas poliatómicas. Niveles de energía y reglas de selección. Espectroscopia Raman. Espectroscopia electrónica. Nomenclatura, características de las bandas. Fluorescencia, fosforescencia. Regla de Kasha.

### Objetivos y Capacidades a Desarrollar

Conocer las leyes que gobiernan la interacción radiación-materia, el origen de la anchura de las bandas de absorción y el origen de las reglas de selección. Conocer los fundamentos de la espectroscopia de rotación y de vibración tanto de las moléculas diatómicas como de las poliatómicas, y los diferentes modelos que se aplican a su interpretación. Conocer el comportamiento de las moléculas como osciladores y adquirir el concepto de modo normal de vibración. Conocer los fundamentos y reglas que gobiernan la espectroscopia Raman de rotación. Conocer los fundamentos y reglas de selección de la espectroscopia vibracional y roto-vibracional, tanto en su manifestación como espectroscopia de infrarrojo como de Raman. Conocer los principios que gobiernan la absorción de radiación en la zona del visible-ultravioleta del espectro, así como los fenómenos fundamentales en fotofísica: la fluorescencia y la fosforescencia.

### 1.13. Referencias de Consulta Básicas / Recommended Reading.

- I.N. LEVINE. Espectroscopia Molecular. AC 1980
- J. BERTRÁN RUSCA y J. NÚÑEZ DELGADO (Eds.) Química Física. Vol I. Editorial Ariel 2002
- A. REQUENA y J. ZÚÑIGA. Espectroscopia. Editorial Prentice Hall 2003.
- V. LUAÑA, V.M. GARCÍA FERNÁNDEZ, E. FRANCISCO y M. RECIO. Espectroscopia Molecular. Servicio de publicaciones de la Universidad de Oviedo. 2002
- C. N. BANWELL y E. M. McCASH. Fundamentals of molecular Spectroscopy. 4ª ed., McGraw-Hill 1994.
- J.M. HOLLAS. Modern Spectroscopy. 3 ed., John Wiley & Sons 1996.
- A. REQUENA y J. ZÚÑIGA. Química Física : Problemas de Espectroscopia. Fundamentos, Atomos, Moléculas Diatómicas. Editorial Prentice-Hall 2007.
- J. BERTRÁN RUSCA y J. NÚÑEZ DELGADO. Problemas de Química Física, Ed. Delta, 2006.

Página Web de la Asignatura: <http://www.qfa.uam.es/aqc/>



## 2 Métodos Docentes / Teaching methods

La enseñanza de la asignatura se estructura esencialmente en la forma de lecciones magistrales, clases de resolución de problemas numéricos y seminarios. Ello supone que parte del aprendizaje se hará mediante el trabajo personalizado del alumno, que deberá resolver las cuestiones y/o problemas que se le propongan con una periodicidad mensual. Los resultados de estos ejercicios serán debatidos con el profesor y el resto de los estudiantes del grupo en seminarios desarrollados en el aula. Así mismo cada profesor realizará tutorías con alumnos individuales o con grupos reducidos de alumnos sobre cuestiones puntuales que éstos planteen. El correo electrónico y la página web de la asignatura complementan la comunicación profesor-alumno.

### Actividades presenciales

Clases magistrales, problemas, seminarios y tutorías. Se imparte el programa por bloques: bloque I, dos semanas; II, seis semanas; III, cuatro semanas, aproximadamente. En cada tema se incluye el desarrollo teórico de los contenidos enfocados hacia la resolución de problemas concretos.

- Clases teóricas

Se impartirán en forma de lecciones magistrales los contenidos básicos para que el alumno pueda desarrollar los trabajos que se le proponen como trabajo personal y que serán debatidos en los seminarios.

- Clases prácticas

Las clases prácticas serán destinadas a la resolución de problemas numéricos relacionados con las diferentes ramas de la espectroscopia

- Seminarios

En los seminarios se discutirán las cuestiones y/o ejercicios numéricos que los profesores de la asignatura hayan propuesto al alumno como parte de su trabajo personal de formación. En estos seminarios la iniciativa deberá ser de los alumnos y el profesor intentará actuar esencialmente como moderador del debate, procurando que dicho debate lleve al afianzamiento de los conceptos esenciales y tratando en todo momento de fomentar la participación activa del mayor número posible de estudiantes.

- **Actividades dirigidas**

- Trabajos individuales y / o en grupo

Cada quincena los profesores de la asignatura propondrán a los alumnos diversas cuestiones o ejercicios numéricos relacionados con un determinado tipo de espectro para que el alumno los resuelva individualmente. Cada alumno



Asignatura:  
Código:  
Grupo:  
Titulación:  
Profesor/a:  
Curso Académico:

entregará al profesor los resultados de su trabajo, que, una vez evaluado por el profesor, le será devuelto. Con el conjunto de respuestas obtenidas, el profesor tendrá una visión de qué cuestiones necesitan ser aclaradas o qué conceptos no han sido apropiadamente asimilados por los alumnos, y dedicará un seminario a abordar estas cuestiones

- Docencia en red:

Los alumnos podrán descargar de la red los ejercicios que se les propongan con la periodicidad antes mencionada. Asimismo podrán encontrar en la misma una cantidad significativa de material suplementario, que va desde el enunciado de los problemas que se le proponen para su resolución en las clases prácticas, hasta una batería de problemas interactivos, enunciados de exámenes de convocatorias anteriores, o enlaces de interés.

- Tutorías ( Incluidas virtuales)

Como se ha indicado en apartados previos, cada profesor realizará tutorías voluntarias con alumnos individuales o con grupos reducidos de alumnos sobre cuestiones puntuales que éstos planteen. Estas tutorías pueden hacerse de forma presencial (despacho) o virtual (e-mail institucional).

### 3 Tiempo estimado de Trabajo del Estudiante / **Estimated workload for the student**

Diez horas semanales de promedio más las horas de docencia presencial.

### 4 Métodos de Evaluación y Porcentaje en la Calificación Final / **Assessment Methods and Percentage in the Final marks**

• **Descripción detallada del procedimiento para la evaluación**

La evaluación de los estudiantes se hará de un modo continuado mediante la evaluación de los trabajos individuales y de su participación activa en los seminarios. Esta evaluación se complementará con la realización de dos ejercicios escritos (no liberatorios de materia) y un examen final de la asignatura.



Asignatura:  
Código:  
Grupo:  
Titulación:  
Profesor/a:  
Curso Académico:

- **Porcentaje en la calificación final**

La calificación en la convocatoria de febrero será:  $0.50 * \text{Nota del examen final} + 0.30 * \text{Nota de los dos ejercicios escritos} + 0.20 \text{ Nota del trabajo personalizado en los seminarios}$ . Se exige que la nota del examen corresponda a un rendimiento mínimo, que se ha establecido en 4 sobre 10.

En la convocatoria extraordinaria la calificación corresponderá al examen final que se realizará en septiembre.

## 5 Cronograma de Actividades (opcional) / **Activities Chronogram (optional)**

- **Calendario de pruebas periódicas:**

Se realizarán dos pruebas escritas para comprobar los conocimientos y madurez del alumno, una en la última semana de noviembre y otra en la primera semana lectiva de enero.

Los seminarios tendrán periodicidad quincenal.