



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: 32

Joaquín Juan Camacho Departamento: Química Física Aplicada
Facultad de Ciencias
Teléfono:
e-mail:
Página Web:
Horario de Tutorías Generales:

Grupo: 37

Rafael López Departamento: Química Física Aplicada
Facultad: Ciencias
Teléfono:
e-mail:
Página Web:
Horario de Tutorías Generales:

1.11. OBJETIVOS DEL CURSO /OBJETIVE 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.

.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



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

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.

BLOQUE III:

Moléculas poliatómicas. Rotación: momentos principales de inercia, moléculas lineales, trompocéficas, 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.



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

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, Átomos, 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 y clases de resolución de problemas numéricos El correo electrónico y la página web de la asignatura, complementan la comunicación profesor-alumno.



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

Actividades presenciales

Se imparte el programa por bloques. 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 para que el alumno pueda aprender la asignatura.

- Clases prácticas

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

- Tutorías

Cada profesor realizará tutorías voluntarias con alumnos individuales o con grupos reducidos de alumnos sobre cuestiones puntuales que éstos planteen

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

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

La calificación corresponderá a la nota que se obtenga en el examen final