



UNIVERSIDAD DE JAÉN

TITULACIÓN: LICENCIATURA EN QUÍMICA

CURSO ACADÉMICO: 2011-2012

GUÍA DOCENTE de QUÍMICA FÍSICA AVANZADA

DATOS BÁSICOS DE LA ASIGNATURA

NOMBRE: Química Física Avanzada

CÓDIGO: 2200-3181

AÑO DE PLAN DE ESTUDIOS: 1995 (adaptado)

TIPO (troncal/obligatoria/optativa) : Troncal

Créditos LRU / ECTS
totales: 7,5/6

Créditos LRU/ECTS
teóricos: 5,5/4,4

Créditos LRU/ECTS
prácticos: 2/1,6

CURSO: 3º

CUATRIMESTRE: 2º

CICLO: 2º

DATOS BÁSICOS DEL PROFESORADO

NOMBRE: Manuel Fernández Gómez

CENTRO/DEPARTAMENTO: Facultad de CC. Experimentales/Química Física y Analítica

ÁREA: Química Física

Nº DESPACHO: B3-104

E-MAIL mfg@ujaen.es

TF: +34-953-212148

URL WEB:

DATOS ESPECÍFICOS DE LA ASIGNATURA

1. DESCRIPTOR

Química cuántica y su aplicación a la espectroscopia. Fenómenos de transporte y superficie. Catálisis. Macromoléculas en disolución

2. SITUACIÓN

La asignatura se impartía en el segundo cuatrimestre del tercer año de la licenciatura

2.1. PRERREQUISITOS: La titulación no imponía pre-requisitos en ninguna de sus materias; por tanto, en esta asignatura no se exigía formalmente pre-requisito alguno.

2.2. CONTEXTO DENTRO DE LA TITULACIÓN: La asignatura jugaba un papel central en la titulación debido, en primer lugar, a su carácter troncal y, en segundo lugar, a su ubicación (2º cuatrimestre, 3er. curso). Sus contenidos suponían el primer contacto que el estudiante tendría en la licenciatura con temas tan importantes como la Química Cuántica aplicada a la Espectroscopia, la Espectroscopia misma (existe una asignatura de Espectroscopia pero es de carácter optativo), los fenómenos superficiales, fenómenos de transporte, catálisis, macromoléculas (existe en la titulación una asignatura dedicada pero de carácter optativo)

2.3. RECOMENDACIONES:

El plan de estudios no establecía asignaturas "puerta". Sin embargo, hubiera sido deseable que los alumnos que se acercaran a esta asignatura lo hubieran hecho después de haber estudiado, y superado, las materias que conformaban el 1er. y 2º cursos de la licenciatura, en especial Química Física I.



UNIVERSIDAD DE JAÉN

3. COMPETENCIAS

3.1. COMPETENCIAS TRANSVERSALES/GENÉRICAS:

Capacidad de análisis y síntesis
Resolución de problemas
Toma de decisiones
Razonamiento crítico
Trabajo en equipo
Aprendizaje autónomo
Creatividad
Liderazgo
Sensibilidad hacia temas medioambientales

3.2. COMPETENCIAS ESPECÍFICAS:

- **Cognitivas (Saber):**

Química cuántica en espectroscopía
Espectros de rotación pura de moléculas diatómicas
Espectros de rotación vibración de moléculas diatómicas
Espectros electrónicos de moléculas diatómicas
Fenómenos de transporte en gases
Fenómenos de transporte en líquidos
Fenómenos superficiales
Fenómenos eléctricos en las interfases
Coloides
Fenómenos de adsorción
Catálisis y fenómenos catalíticos
Catálisis homogénea y heterogénea
Generalidades y síntesis de macromoléculas
Caracterización de macromoléculas en disolución

- **Procedimentales/Instrumentales (Saber hacer):**

Capacidad para demostrar el conocimiento y comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionados con la química.
Resolución de problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados
Reconocer y analizar problemas y planear estrategias para solucionarlos
Evaluación, interpretación y síntesis de datos e información química
Procesar y computar datos en relación con información y datos químicos
Interpretación de datos procedentes de observaciones y medidas en el laboratorio en términos de su significación y de las teorías que la sustentan

- **Actitudinales (Ser):**

Disponibilidad al cambio
Capacidad para adaptarse o para promoverlo
Gusto por el trabajo bien hecho y responsable
Desarrollar una conducta caracterizada por el equilibrio personal, la sensatez, la autonomía y el juicio crítico en la capacidad de toma de decisiones.
Mostrar una actitud de motivación hacia nuevos retos y capacidad de adaptación a experiencias innovadoras.
Poner en práctica habilidades interpersonales de empatía, capacidad de escucha activa, comunicación fluida y colaboración permanente.
Respetar otras opiniones con asertividad personal y control de la situación

4. OBJETIVOS

Proporcionar las bases cuánticas de la espectroscopía. Estudiar los espectros de vibración, rotación, vibración-rotación y electrónicos de moléculas diatómicas. Estudiar los procesos de transporte en gases y líquidos. Estudiar fenómenos superficiales y de adsorción. Estudiar procesos catalíticos, homogéneos y heterogéneos y dar nociones de la química física de macromoléculas



UNIVERSIDAD DE JAÉN

5. METODOLOGÍA

NÚMERO DE HORAS DE TRABAJO DEL ALUMNO:

SEGUNDO CUATRIMESTRE:

Nº de Horas:

- Clases Teóricas*:
- Clases Prácticas*:
- Exposiciones y Seminarios*:
- Tutorías Especializadas (presenciales o virtuales):
 - A) Colectivas*:
 - B) Individuales:
- Realización de otras Actividades Académicas Dirigidas:
 - A) Con presencia del profesor*:
 - B) Sin presencia del profesor:
- Otro Trabajo Personal Autónomo:
 - A) Horas de estudio:
 - B) Preparación de Trabajo Personal:
 - C) ...
- Realización de Exámenes:
 - A) Examen escrito:
 - B) Exámenes orales (control del Trabajo Personal):

* Horas presenciales

[Esta asignatura se impartió por última vez durante el curso 2010-11.](#)



UNIVERSIDAD DE JAÉN

6. TÉCNICAS DOCENTES (señale con una X las técnicas que va a utilizar en el desarrollo de su asignatura. Puede señalar más de una. También puede sustituirlas por otras):		
Sesiones académicas teóricas	Exposición y debate:	Tutorías especializadas: x
Sesiones académicas prácticas	Visitas y excursiones:	Controles de lecturas obligatorias:
Otros (especificar):		
DESARROLLO Y JUSTIFICACIÓN:		
7. BLOQUES TEMÁTICOS (dividir el temario en grandes bloques temáticos; no hay número mínimo ni máximo) a) Química Cuántica aplicada a la espectroscopia, b) espectroscopia de moléculas diatómicas, c) fenómenos de transporte, d) fenómenos de superficie, e) adsorción, f) catálisis, g) macromoléculas		
8. BIBLIOGRAFÍA		
8.1 GENERAL Bertrán, J., Núñez, J. (Eds.) Química Física, Ariel, Barcelona 2002 Berry, R.S., Rice, S., Ross, J. Physical Chemistry 2 nd . Ed., Wiley New York 2000 Levine, I.N., Physical Chemistry 5th. Ed. McGrawHill Nueva York 2001 Schrader, B., Infrared and Raman Spectroscopy. Methods and applications. Wiley 1995 Graybeal, J.D. Molecular Spectroscopy, McGrawHill, 1993		
8.2 ESPECÍFICA (con remisiones concretas, en lo posible) Adamson, A.W., The physical chemistry of surfaces, 6 ^o Ed., Wiley, New York 1997 Deen, W.M., Analysis of transport phenomena, OUP, New York, 1998 Bowker, M., The basis and applications of heterogeneous catalysis, OUP, 1998 Sun, S.F., Physical Chemistry of macromolecules. Basis principles and issues, Wiley 1994		
9. TÉCNICAS DE EVALUACIÓN (enumerar, tomando como referencia el catálogo de la correspondiente Guía Común) Examen escrito		
Criterios de evaluación y calificación (referidos a las competencias trabajadas durante el curso): El examen supondrá el 100% de la nota		



UNIVERSIDAD DE JAÉN

11. TEMARIO DESARROLLADO *(con indicación de las competencias que se van a trabajar en cada tema)*

Lección 1.- Química cuántica en espectroscopía

-) Ecuación de ondas de Schrödinger dependiente del tiempo y transiciones entre estados de un sistema
-) Teoría de las perturbaciones degeneradas de primer orden
-) Acoplamiento de momentos angulares
-) Estados espectroscópicos. Spin y simetría
-) Las reglas de selección en espectroscopía
-) Espectros de radiación de dipolo y espectros Raman

Competencias

Conocer en alguna medida la aplicación de Química cuántica en espectroscopia

Capacidad para demostrar el conocimiento y comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionados con la química

Reconocer y analizar problemas y planear estrategias para solucionarlos

Lección 2.- Espectros de rotación pura de moléculas diatómicas

-) El rotor rígido. Niveles de energía y reglas de selección
-) El efecto de la distorsión centrífuga. El rotor elástico
-) Análisis del espectro de microondas
-) El espectro Raman de rotación pura. Reglas de selección
-) Degeneración y población de los niveles rotacionales. Influencia del spin nuclear

Competencias

Comprender las bases teóricas y las aplicaciones de la espectroscopia de rotación sobre los sistemas más sencillos (moléculas diatómicas)

Capacidad para demostrar el conocimiento y comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionados con la química

Reconocer y analizar problemas y planear estrategias para solucionarlos

Lección 3.- Espectros de rotación vibración de moléculas diatómicas

-) Vibraciones armónicas de moléculas diatómicas. Niveles de energía y reglas de selección
-) El oscilador anarmónico. Niveles de energía y reglas de selección
-) Interacción de rotación-vibración. Modelo del rotor elástico-oscilador armónico
-) Niveles de energía y transiciones permitidas en IR y Raman
-) Constantes espectroscópicas desde los espectros de vibración rotación

Competencias

Comprender las bases teóricas y las aplicaciones de la espectroscopia de vibración- rotación de moléculas diatómicas

Capacidad para demostrar el conocimiento y comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionados con la química

Reconocer y analizar problemas y planear estrategias para solucionarlos

Lección 4.- Espectros electrónicos de moléculas diatómicas

-) Clasificación de los estados electrónicos. Números cuánticos y simetría electrónica
-) Tipos de transiciones electrónicas. Reglas de selección
-) Estructura vibracional de las transiciones electrónicas. Energía de disociación
-) Intensidades de las transiciones electrónicas. Principio de Franck-Condon
-) Espectros ultravioleta-visible de moléculas diatómicas



UNIVERSIDAD DE JAÉN

Competencias

Comprender las bases teóricas y las aplicaciones de la espectroscopia electrónica de moléculas diatómicas
Capacidad para demostrar el conocimiento y comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionados con la química

Reconocer y analizar problemas y planear estrategias para solucionarlos

Lección 5.- Fenómenos de transporte en gases

-) Generalidades sobre cinética física
-) Choques moleculares y recorrido libre medio
-) Ecuación general para los fenómenos de transporte
-) Conductividad térmica en gases. Ley de Fourier
-) Viscosidad en gases. Ley de Newton
-) Difusión en gases. Ley de Fick
-) Aplicaciones de la difusión. Transpiración térmica y producción de alto vacío.

Competencias

Comprender las bases teóricas y las aplicaciones de la cinética física comenzando por el transporte de calor y la difusión en gases

Capacidad para demostrar el conocimiento y comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionados con la química

Reconocer y analizar problemas y planear estrategias para solucionarlos

Lección 6.- Fenómenos de transporte en líquidos

-) Medidas de la viscosidad de líquidos puros y mezclas de líquidos. Viscosímetro de Ostwald
-) Viscosidad de líquidos. Ecuación de Poiseuille
-) Difusión en líquidos. Ecuaciones de Einstein-Smoluchowski y de Stokes-Einstein
-) Movimiento Browniano de partículas en disolución
-) Difusión y conductividad eléctrica. Ecuación de Nernst-Einstein
-) Sedimentación

Competencias

Comprender las bases teóricas y las aplicaciones de la cinética física en líquidos

Capacidad para demostrar el conocimiento y comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionados con la química

Reconocer y analizar problemas y planear estrategias para solucionarlos

Lección 7.- Fenómenos superficiales I

-) La tensión superficial y su medida
-) Ecuación de Young-Laplace
-) Presión de vapor en superficies curvas
-) Tensión superficial en disoluciones
-) Isoterma de Gibbs
-) Monocapas. Tensión superficial y ecuación de estado de un monoestrato

Competencias

Comprender las bases teóricas que explican la tensión superficial de líquidos y disoluciones y su dependencia con el radio de curvatura y la composición. Comprender qué se entiende por concentración superficial de exceso y obtener la ecuación de estado de un monoestrato

Capacidad para demostrar el conocimiento y comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionados con la química

Reconocer y analizar problemas y planear estrategias para solucionarlos

Lección 8.- Fenómenos superficiales II

-) Fenómenos eléctricos en las interfaces. Doble capa eléctrica



UNIVERSIDAD DE JAÉN

-) Fenómenos electrocapilares
-) Fenómenos electrocinéticos
-) Coloides
-) Electrolitos coloidales. Jabones y detergentes
-) Emulsiones y espumas

Lección 9.- Fenómenos de adsorción I

-) Tipo de adsorción. Fisisorción y quimisorción
-) Isotermas de adsorción. Ecuación de Henry
-) Isotherma de Langmuir. Adsorción de una mezcla de gases
-) Isotherma B.E.T. Adsorción polimolecular
-) Interpretación estadística de las isotermas

Lección 10.- Fenómenos de adsorción II

-) Interacción adsorbato-adsorbato. Diferentes isotermas
-) Métodos experimentales en los procesos de adsorción
-) Ecuación de estado e isoterma de adsorción
-) Calor, entropía y energía libre de adsorción. Isósteras de adsorción
-) Medidas de áreas superficiales
-) Adsorción de disoluciones en sólidos. Isotermas de adsorción

Lección 11.- Catálisis y fenómenos catalíticos

-) Generalidades sobre los fenómenos catalíticos. Tipos de catálisis
-) Catálisis y equilibrio químico
-) Mecanismo general de la catálisis
-) Energías de activación y procesos catalíticos

Lección 12.- Catálisis homogénea I

-) Características generales de los procesos catalíticos homogéneos
-) Cinética de los procesos catalíticos homogéneos
-) Tipos de catálisis homogénea en disolución
-) Catálisis por transferencia de electrones

Lección 13.- Catálisis homogénea II

-) Catálisis ácido-base específica y general
-) Relaciones de Brønsted-Pedersen
-) Funciones de acidez
-) Catálisis electrofílicas y nucleofílicas
-) Autocatálisis
-) Reacciones oscilantes

Lección 14.- Catálisis heterogénea I

-) Tipos de catalizadores
-) Características de los procesos catalíticos heterogéneos
-) Energía de activación y activación catalítica
-) Características de las reacciones controladas por difusión y por reacción
-) Cinética de las reacciones catalíticas heterogéneas

Lección 15.- Catálisis heterogénea II

-) Hipótesis de los centros activos
-) Teoría multiplética de la catálisis



UNIVERSIDAD DE JAÉN

-) Adsorción y catálisis heterogénea
-) Teoría de los conjuntos activos
-) Distribución de los centros activos

Lección 16.- Generalidades y síntesis de macromoléculas

-) Concepto de macromolécula. Tipos
-) Síntesis de macromoléculas. Mecanismos y cinética de polimerización
-) Pesos moleculares y su distribución
-) Pesos moleculares promedio

Lección 17.- Caracterización de macromoléculas en disolución

-) Presión osmótica
-) Viscosidad y concentración. Fórmula de Huggins
-) Difusión de la luz. Tamaño de partícula y longitud de onda incidente. Gráficos de Zimm
-) Ultracentrifugación. Velocidad y equilibrios de sedimentación
-) Aplicación a la determinación de la masa molecular

12. MECANISMOS DE CONTROL Y SEGUIMIENTO *(al margen de los contemplados a nivel general para toda la experiencia piloto, se recogerán aquí los mecanismos concretos que los docentes propongan para el seguimiento de cada asignatura):*

El control y seguimiento se llevarán a cabo mediante el examen