



FITXA IDENTIFICATIVA

DADES DE L'ASSIGNATURA

Codi: 36451
Nom: Química Física II
Cicle: Grau
Crèdits ECTS: 6
Curs acadèmic: 2025-26

TITULACIONS

Titulació	Centre	Curs	Període
1110 - Grau de Química	Facultat de Química	3	Primer quadrimestre
1934 - Doble Grau en Química i Enginyeria Química	Facultat de Química	3	Primer quadrimestre

MATÈRIES

Titulació	Matèria	Caràcter
1110 - Grau de Química	Química Física	OBLIGATÒRIA
1934 - Doble Grau en Química i Enginyeria Química	Tercer curs	OBLIGATÒRIA

COORDINACIÓ

ORTI GUILLEN ENRIQUE

RESUM

Amb l'assignatura de **Química Física II** es pretén, essencialment, que l'alumne adquireixca coneixements bàsics de dues parts fonamentals de la Química-Física, com són la Química Quàntica i l'Espectroscòpia. La Química Quàntica consisteix en l'aplicació de la Física Quàntica a l'estudi de l'estructura atòmica i molecular. L'Espectroscòpia es pot definir com l'estudi de la interacció de la radiació electromagnètica amb la matèria i utilitza principalment coneixements de Química Quàntica. Ambdues matèries són cada vegada més interdisciplinàries, ja que s'usen comunament en altres branques de la química.

Per tant, amb aquesta assignatura s'establiran les bases necessàries perquè l'estudiant pugui abordar posteriorment amb èxit l'estudi de diferents parts de la Química i de la pròpia Química Física, que utilitzen habitualment els conceptes de Química Quàntica i Espectroscòpia.

CONEIXEMENTS PREVIS

RELACIÓ AMB ALTRES ASSIGNATURES DE LA MATEIXA TITULACIÓ



No s'ha especificat restriccions de matrícula amb altres assignatures del pla d'estudis.

ALTRES TIPUS DE REQUISITS

Aquesta assignatura no té restriccions de matrícula amb cap altra de la titulació. En tot cas, per tal de poder abordar amb èxit l'assignatura, són imprescindibles coneixements bàsics previs, del nivell exigít en el primer curs del Grau en Química, en:

- Mecànica i Electromagnetisme (Física I i II).
- Estructura atòmica i molecular (Química I).
- Matemàtiques: logaritmes, exponencials, nombres complexos, derivades i integrals senzilles, equacions diferencials ordinàries i fonaments d'estadística.

COMPETÈNCIES / RESULTATS D' APRENENTATGE

DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

1. Conceptes bàsics. Principis de la Mecànica Quàntica

Desenvolupament de la teoria quàntica. Dualitat ona-corpúscle. Equació de Schrödinger. Formalisme matemàtic. Postulats de la mecànica quàntica. Estats estacionaris. Principi d'incertesa

2. Sistemes model

Moviment de translació: partícula en un recinte unidimensional. Partícula en un recinte bidimensional. Tècnica de separació de variables. Barreres finites i efecte túnel. Moviment vibracional: Oscil·lador harmònic.

3. Àtom d'hidrogen

Introducció. Moment angular orbital. Rotor rígid. Àtom d'hidrogen: plantejament de la solució formal de l'equació de Schrödinger. Energies i funcions dels estats lligats. Moment angular de spin.

4. Àtoms polielectrònics

Àtoms polielectrònics: plantejament general. Mètodes aproximats. Àtom d'Heli. Aproximació orbital. Principi de anti-simetria. Orbitals autoconsistents (SCF). Estats electrònics.

Molècules polielectròniques: plantejament general. Aproximació de Born-Oppenheimer. La molècula ió d'hidrogen (mètode OM-CLOA). La molècula d'hidrogen. Molècules diatòmiques. Molècules poliatòmiques.



5. Estructura molecular

Sistemes pi-electrònics. Mètode de Hückel.

6. Fonaments d'Espectroscòpia

La radiació electromagnètica. Espectroscòpia: tipus d'espectres. Interacció radiació matèria: aproximació semi-clàssica. Llei de distribució de Boltzmann. El senyal espectroscòpic: posició, intensitat i amplària. Intensitat d'un senyal espectroscòpic. Llei de Lambert-Beer. Emissió làser

7. Espectroscòpies de Rotació i Vibració

Espectroscòpies de moviment nuclear col·lectiu. Nivells d'energia rotacional de molècules diatòmiques i lineals. Espectres de rotació pura. Espectroscòpia de microones. Nivells d'energia vibracional. Espectres de vibració de molècules diatòmiques. Espectres de rotació-vibració. Espectres de vibració de molècules poliatòmiques: modes normals de vibració. Espectroscòpia IR. Espectroscòpia Raman.

8. Espectroscòpia Electrònica

Interpretació quàntica dels espectres electrònics: molècules diatòmiques. Estructura vibracional: principi de Franck-Condon. Regles de selecció. Espectroscòpia electrònica de molècules poliatòmiques. Fluorescència i fosforescència.

VOLUM DE TREBALL (HORES)

ACTIVITATS PRESENCIALS

Activitat	Hores
Tutories	9,00
Teoria	51,00
Total hores	60,00

ACTIVITATS NO PRESENCIALS

Activitat	Hores
Assistència a altres activitats	0,00
Elaboració de treballs individuals o en grup	0,00
Estudi i treball autònom	90,00
Preparació de classes	0,00
Preparació d'activitats d'avaluació	0,00
Resolució de casos pràctics	0,00
Total hores	90,00



METODOLOGIA DOCENT

El desenvolupament de l'assignatura s'estructura al voltant dels següents eixos:

- les classes teòriques
- les tutories grupals

Pel que fa a les primeres, en elles s'oferirà una visió global del tema tractat i s'incidirà en aquells conceptes clau necessaris per a la seua comprensió. Així mateix, s'indicaran els recursos més recomanables per a la preparació posterior del tema en profunditat.

Les tutories es dedicaran al plantejament i resolució de problemes i qüestions, les quals permetran identificar els elements i conceptes essencials de cada tema. Per a aquestes sessions, es proporcionarà una llista de qüestions i problemes que servirà per reforçar els coneixements i exercitar-se en cadascun dels aspectes tractats. L'alumne/a haurà de lliurar resoltos els problemes i qüestions que el Professor indique.

AVALUACIÓ

S'utilitzaran els següents sistemes d'avaluació:

- Proves consistents en Exàmens Escrits, Orals i/o Pràctics.
- Avaluació de les sessions de tutories grupals, seminaris, elaboració de treballs i/o exposicions orals.
- Avaluació contínua de cada alumne basada en les activitats presencials, participació i grau d'implicació en el procés d'ensenyament-aprenentatge.

L'avaluació de l'aprenentatge dels estudiants tindrà en compte tots els aspectes exposats en l'apartat de metodologia d'esta guia docent.

Modalitat A

PRIMERA CONVOCATÒRIA

La qualificació final constarà de:

L'examen (75%), que consistirà en una sèrie de qüestions teòriques i problemes numèrics, els quals



tractaran sobre els conceptes bàsics impartits en classe. L'examen serà el mateix per a tots els grups.

Avaluació contínua (25%), que contempla proves d'avaluació realitzades al llarg del curs en forma de tests de resposta múltiple o breu, l'avaluació de les sessions de tutories grupals, mitjançant la realització i/o lliurament d'exercicis i qüestions, i l'avaluació contínua de cada alumne basada en la participació i grau d'implicació en el procés d'ensenyament-aprenentatge. **Únicament en casos excepcionals i en el termini establert pels professors, es podrà renunciar a esta modalitat A.**

La qualificació mínima de l'examen escrit haurà de ser igual o superior a 4,5 sobre 10 per a poder fer una mitjana amb la nota de l'avaluació contínua. La qualificació global mínima per a aprovar l'assignatura és 5,0 sobre 10.

SEGONA CONVOCATÒRIA

En la segona convocatòria els estudiants realitzaran un examen consistent en una sèrie de qüestions teòriques i problemes numèrics, els quals tractaran sobre els conceptes bàsics impartits en classe. L'examen serà el mateix per a tots els grups. La qualificació final, incloent-hi l'avaluació contínua, es realitzarà utilitzant la mateixa ponderació que en la primera convocatòria. La qualificació global mínima per a aprovar l'assignatura és 5,0 sobre 10.

Modalitat B

Esta modalitat únicament s'acceptarà en aquells casos molt excepcionals en els quals el professor haja acceptat la sol·licitud de l'estudiant.

PRIMERA I SEGONA CONVOCATÒRIA

La qualificació final constarà de l'examen (90%) i de les activitats d'avaluació contínua (10%).

La qualificació mínima de l'examen escrit haurà de ser igual o superior a 4,5 sobre 10 per a poder fer una mitjana amb la nota de l'avaluació contínua. La qualificació global mínima per a aprovar l'assignatura és 5,0 sobre 10.

La modalitat per defecte serà l'A. Accedir a la modalitat B requerirà una justificació sobre la no possibilitat d'acudir a les activitats presencials i l'aprovació per part del professor que impartisca l'assignatura.



Advertiment final

La còpia o plagi manifest de qualsevol tasca que forma part de l'avaluació suposarà la impossibilitat de superar l'assignatura, sotmetent-se seguidament als procediments disciplinaris oportuns.

Tinga's en compte que, d'acord amb l'article 13 d) de l'Estatut de l'Estudiant Universitari (RD 1791/2010, de 30 de desembre), "és deure d'un estudiant abstenir-se en la utilització o cooperació en procediments fraudulents en les proves d'avaluació, en els treballs que es realitzen o en documents oficials de la Universitat".

BIBLIOGRAFIA

- ATKINS, P.W., de PAULA, J., Química Física, 8ª ed., Ed. Médica Panamericana, 2008. ISBN 9789500612487
- LEVINE, I.N., Fisicoquímica, 5ª ed., McGraw-Hill, 2004. ISBN 9788448137861 (v.1) ISBN 978844137878 (v.2)
- ENGEL, T. y REID, P. Química Física, Pearson Education, 2006 ISBN 10-84-7829-077-X
- ATKINS, P. W, de PAULA, J., Química Física, Physical Chemistry, 9ª ed., Oxford University Press, 2010. ISBN 97801995437878
- LEVINE, I. N., Physical Chemistry, 6ª ed., McGraw-Hill, 2008. ISBN 9780072538625 (v.1) ISBN 9780071276368 (v.2)
- BERTRAN, J. y col., Química Cuántica: Fundamentos y aplicaciones computacionales, 2ª ed., Síntesis, 2002.
- HANNA, W., Mecánica Cuántica para Químicos, Fondo Educativo Interamericano, 1985.
- PLANELLES, J., CLEMENTE, I. y GABRIEL, J., Noves Notes de Química Cuàntica, Publicacions de la Universitat Jaume I, 2ªed, 2010. www.uji.es/bin/publ/edicions/quimicaq.pdf.
- McQUARRIE, D. A., Quantum Chemistry, 2ª ed, University Science Books; 2007.
- BROWN, J. M., Molecular Spectroscopy, Oxford University Press, 1998.



- BANWELL, C. N. y McCASH, E. M., Fundamentals of Molecular Spectroscopy, 4^a ed., McGraw-Hill, 1994.
- PLANELLES, J. CLEMENTE, I. y GABRIEL, J., Espectroscòpia, Publicacions de la Universitat Jaume I, 2002.
- DIAZ PEÑA, M. y ROIG MUNTANER, A., Química Física, Vol. 1, Alhambra, 1972.
- CRUZ-GARRITZ, D., CHAMIZO, J. A. y GARRITZ, A., Estructura atómica: un enfoque químico, Addison-Wesley Iberoamericana, 1987.
- LEVINE, I.N., Química Cuántica, 5^a ed., Prentice Hall, 2001.
- REQUENA, A. y ZUÑIGA, J., Espectroscopia, Pearson Prentice Hall, 2003.
- HOLLAS, J. M., Modern Spectroscopy, 2^a ed., John Wiley & Sons, 1992.
- BARROW, G. M., Introduction to Molecular Spectroscopy, McGraw-Hill, 1962.