



## PRESENTACIÓN

### Breve descripción:

- **Titulación:** Degree in Chemistry-09
- **Módulo/Materia:** Experimental Chemistry / Physical Chemistry
- **ECTS:** 1.5
- **Curso, semestre:** 2nd year, 2nd semester
- **Carácter:** compulsory
- **Profesorado:** Supervisor Prof. Gustavo González Gaitano
- **Idioma:** English
- **Aula, Horario:** see School of Sciences website

## COMPETENCIAS

(See document "Modifica" to the Verifica-Graduado en Química por la Universidad de Navarra and RD 1393/2007, annex I, article 3.2)

### Competencias específicas

CE2 Procesar, computar, evaluar, interpretar y sintetizar datos e información Química.

CE3 Planificar, diseñar y ejecutar investigaciones y experimentos prácticos, desde la identificación del problema hasta la evaluación de resultados incluyendo su redacción y exposición escrita -en informes fidedignos y coherentes- u oral.

CE4 Manejar instrumentación Química estándar, propia de caracterizaciones, determinaciones y separaciones.

CE5 Relacionar, prever e interpretar el comportamiento y propiedades macroscópicas de los tipos de materiales más relevantes como resultado de una determinada composición Química y microestructura.

CE9 Conocer las características de los estados de la materia.

CE11 Analizar los principios de disciplinas diversas tales como la termodinámica, la mecánica cuántica, la espectroscopía y la electroquímica. Conocer sus aplicaciones en Química, su papel en la descripción de estructura y propiedades de átomos y moléculas o su función en técnicas de investigación analítica o estructural.

CE12 Conocer los materiales más relevantes, sus propiedades, en función de su composición Química y estructura. Identificar las diversas técnicas de análisis y de determinación estructural.

### Competencias generales y básicas

CG2 Pensar de forma integrada y abordar los problemas desde diferentes perspectivas. Tener razonamiento crítico. Aportar soluciones a problemas en el ámbito científico.



# Universidad de Navarra

CG3 Trabajar en equipo, seleccionar y elegir la metodología de trabajo y distribución de funciones. Saber escuchar y hacer uso de la palabra con intervenciones positivas y constructivas.

CG4 Fomentar el sentido de responsabilidad, aplicar en la profesión y en la vida cotidiana la ética desde una perspectiva científica. Buscar información, evaluarla, así como analizar, sintetizar, resumir, comunicar, citar y presentar trabajos.

CG5 Comunicar de forma escrita y oral sobre temas relacionados con la profesión con un estilo y lenguaje adecuado a la situación y al interlocutor.

CG6 Usar correctamente el método de inducción. Ser capaz de generalizar el conocimiento obtenido en una ocasión a otros casos u ocasiones semejantes que puedan presentarse en el futuro.

CB2 Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos a su trabajo o vocación de una forma profesional y posean las competencias que suelen demostrarse por medio de la elaboración y defensa de argumentos y la resolución de problemas dentro de su área de estudio.

CB4 Que los estudiantes puedan transmitir información, ideas y soluciones a un público tanto especializado como no especializado.

CB5 Que los estudiantes hayan desarrollado aquellas habilidades de aprendizaje necesarias para emprender estudios posteriores con un alto grado de autonomía.

## PROGRAMA

1. Atomic spectroscopy: Emission and absorption spectra. Calculation of coupling constants.
2. UV-visible spectroscopy (I): Acid-base reactions in electronic excited states.
3. UV-visible spectroscopy (II): Einstein coefficients.
4. Fluorescence spectroscopy (I): Instrumentation, excitation and emission spectra, Raman and Rayleigh scattering
5. Fluorescence spectroscopy (II): Applications in micellar media. Time resolved fluorescence.
6. FTIR spectroscopy: Instrumentation. Bond distances in different vibrational states.
7. NMR spectrometry: Instrumentation. Application to the study of a small molecules.
8. Computational Chemistry: Molecular Mechanics and Quantum Chemistry methods

## ACTIVIDADES FORMATIVAS

### Objectives about knowledge

- The consolidation of the theoretical concepts acquired in "Quantum Chemistry and Spectroscopy" by their application to case studies.



# Universidad de Navarra

- The knowledge and handling of the most important techniques of atomic and molecular spectroscopy.

## Objectives about competence and aptitude

- The student must be capable of linking the macroscopic properties with those of atoms, molecules and bonds by the experimental study of the interaction between radiation and matter.
- The student must be capable of applying tools of numerical calculus to the solution of problems in Physical Chemistry.

## Activities

- Lectures, prior to the laboratory work. The supervisor will present the theoretical background, methodology of the experiment and objectives. The documentation necessary will be available in intranet ADI.
- Practical sessions under the guidance of the supervisor. The attendance of these sessions is compulsory for the students.
- Tutorships.
- Personal work, dedicated to the preparation and study of each experiment, and study of the subject and making of the reports.
- Evaluation (see Evaluation section).

## Time distribution

- Classes: 6 h
- Laboratory: 18 h
- Tutorship: 1 h
- Examination: 1 h
- 10-12 h of personal study, work in group for solving problems, preparation of results, etc,...

The detailed schedule of the laboratory sessions will be handed to the student at the beginning of the semester

## EVALUACIÓN

### CONVOCATORIA ORDINARIA

- Final exam comprising theoretical-practical questions.
- After each laboratory session, the student must prepare a written report with the experimental results and discussion. The final grade is the average between the mark of the exam and those of the reports.

### CONVOCATORIA EXTRAORDINARIA

- Final exam comprising theoretical-practical questions, provided all the reports have been turned in.

## HORARIOS DE ATENCIÓN

Please, contact Prof. Gustavo González Gaitano ([gaitano@unav.es](mailto:gaitano@unav.es))

Research Building, office 1-050



## BIBLIOGRAFÍA

### Textbooks

1. Shoemaker, D. P et al. "Experiments in Physical Chemistry. 8th ed." Ed. McGraw-Hill: 2009 [Localízalo en la Biblioteca](#)
2. Halpern, Arthur M. "Experimental physical chemistry : a laboratory textbook". Prentice Hall: 1997 [Localízalo en la Biblioteca](#)
3. Atkins P. W. "Química Física. 8th ed". Ed. Médica Panamericana: 2008 [Localízalo en la Biblioteca](#)
4. Levine I. N. "Fisicoquímica (2º vol.)". 5ª edición. Ed. Mc Graw-Hill: 2013 (Libro electrónico) [Localízalo en la Biblioteca](#)
5. Engel, T.; Reid, P. "Química Física". Ed. Pearson: 2006 (Libro electrónico) [Localízalo en la Biblioteca](#)
6. McQuarrie, D. A.; Simon, J.D. "Physical Chemistry. A molecular approach". Ed. University Science Books: 1997 [Localízalo en la Biblioteca](#)

### Electronic resources

1. ArgusLab: <http://www.arguslab.com/arguslab.com/ArgusLab.html>
2. ATKINS ("Physical Chemistry"): <https://learninglink.oup.com/access/pchem11e/>
3. The Wolfram Integrator: <http://integrals.wolfram.com>
4. Mathworld: <http://mathworld.wolfram.com>
5. Updated compilation of web sites of interest, available in ADI