Universidad de Navarra

Química cuántica y espectroscopía (F.Ciencias)

Guía docente 2025-26

PRESENTACIÓN

Breve descripción:

- **Titulación**: Grado en Química-09
- **Módulo/Materia**: Fundamentos teóricos de la Química / Química Física
- **ECTS**: 6
- **Curso, semestre**: 2º curso, 2º semestre
- **Carácter**: obligatoria
- **Profesorado**: Prof. Gustavo González Gaitano
- **Idioma**: español
- **Aula, Horario**: consultar sitio web de la Facultad de Ciencias

RESULTADOS DE APRENDIZAJE (Competencias)

(Cfr. Memoria "Modifica" del Grado en Química por la UN, así como RD 1393/2007, anexo I, artículo 3.2)

Competencias específicas

CE1 Analizar y resolver problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados, así como reconocer nuevos problemas y planificar estrategias para su resolución.

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

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

CG1 Planificar y organizar el tiempo y gestionar la propia formación continua, actualizando el conocimiento de las innovaciones del ámbito científico y saber analizar las tendencias de futuro.

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

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.

CB1 Que los estudiantes hayan demostrado poseer y comprender conocimientos en un área de estudio que parte de la base de la educación secundaria general, y se suele encontrar a un nivel, que si bien se apoya en libros de texto avanzados, incluye también algunos aspectos que implican conocimientos procedentes de la vanguardia de su campo de estudio.

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 trasmitir 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. Introducción

Repaso de algunos conceptos de la mecánica clásica. Radiación del cuerpo negro. Efecto fotoeléctrico. Espectros atómicos y modelo atómico de Bohr. Dualidad onda-corpúsculo. El principio de incertidumbre.

2. Fundamentos de Mecánica cuántica

Función de onda. Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo. Densidad de probabilidad. Condición de normalización. Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. Soluciones aceptables. Operadores en Mecánica cuántica. Funciones propias y valores propios. Cálculo de valores medios de propiedades. Operadores hermíticos y propiedades.

3. Resolución de la ecuación de Schrödinger para algunos sistemas

Partícula en una caja. Funciones de onda ortogonales. Revisión del principio de incertidumbre. La partícula en una caja 2D y 3D. Partícula en un anillo. El rotor rígido.

4. El átomo de hidrógeno

Energía en el estado fundamental. Función de onda para átomos hidrogenoides. Números cuánticos. Funciones de onda reales. Orbitales. Función de distribución radial. Momento angular orbital. El espín del electrón.

5. Átomos multielectrónicos

Aproximación orbital. Principio de exclusión de Pauli. Carga nuclear efectiva. Estructura de átomos multielectrónicos.Métodos aproximados para la resolución de la ecuación de Schrödinger: métodos de variaciones y de perturbaciones: aplicación al átomo de He. Momento angular orbital total y de espín. Acoplamiento Russell-Saunders y JJ. Reglas de selección y espectros atómicos.

6. Estructura electrónica de moléculas

La aproximación de Born-Oppenheimer. Teoría del enlace de valencia. Orbitales híbridos. Teoría del orbital molecular. Moléculas diatómicas homonucleares y heteronucleares. Sistemas conjugados: método de Hückel. Métodos semiempíricos y *ab initio*.

7. Espectroscopía rotacional y vibracional.

Radiación electromagnética y tipos de espectroscopía. Características de los espectros. Anchura e intensidad de las líneas espectrales. Espectros de rotación pura. Tipos de rotores rígidos y niveles de energía. Rotores no rígidos. Vibración en moléculas diatómicas. El oscilador armónico y reglas de selección. Anarmonicidad y potencial de Morse. Espectros IR de vibración-rotación. Vibración en moléculas poliatómicas. Efecto Raman y espectros de rotación pura y vibración.

8. Espectroscopía electrónica molecular

Principio de Franck-Condon. Espectros de absorción molecular y tipos. Descripción de procesos fotofísicos y fotoquímicos. Fluorescencia y fosforescencia. Cinética fotoquímica. Quenching y ecuación de Stern-Volmer. Coeficientes de Einstein: láseres.

9. Espectroscopía de Resonancia Magnética

Interacción de núcleos y electrones con momentos magnéticos externos. Resonancia magnética nuclear (RMN). Apantallamiento y desplazamiento químico. Acoplamiento espín-espín y estructura fina de los espectros. Técnicas de pulsos en RMN. Resonancia electrónica de espín (RSE).

ACTIVIDADES FORMATIVAS

Actividades

- Clases expositivas. Clases teóricas presenciales en las que se explicarán los temas de la asignatura, según el horario publicado en la web a comienzo de curso. Al comenzar cada tema, el alumno tendrá a su disposición en ADI la documentación que el profesor considere necesaria para facilitar el seguimiento de las clases.
- Seminarios de problemas. A lo largo del curso se realizarán seminarios incluidos en el horario al finalizar cada tema. Se propondrán problemas que se asignarán previamente a los estudiantes para su exposición en el aula.
- Tutorías. Los alumnos podrán acudir a tutorías previa cita con el profesor para resolver dudas que hayan podido surgir en relación con la asignatura.
- Trabajo personal del alumno. Tiempo dedicado al estudio de la asignatura y a la preparación de distintas actividades.
- Evaluación. El alumno ha de demostrar si ha alcanzado los objetivos de la asignatura. El procedimiento de evaluación se describe en el apartado “Evaluación”.

Distribución

- Clases teóricas presenciales, incluyendo seminarios de problemas sobre los contenidos teóricos con problemas propuestos: 50 h.
- Tutorías para resolver posibles dudas que surjan durante el trabajo personal.
- Estudio personal: 60 h.

- Evaluación: examen final (máximo de 5 h), un examen parcial (3 h).

EVALUACIÓN

CONVOCATORIA ORDINARIA

- Se realizarán dos pruebas parciales. La calificación de la asignatura corresponde a la media de los dos exámenes.
- Cada parcial comprende una parte de cuestiones teórico-prácticas y problemas teóricos y numéricos. La segunda prueba tendrá carácter de examen final para aquellos que no han llegado a una nota mínima de 5 en la prueba anterior.
  - Los seminarios de problemas se asignarán al alumno para que los presente en clase, lo que se anunciará con la suficiente antelación, lo que permite obtener hasta 0.5 puntos adicionales sobre la nota final.

CONVOCATORIA EXTRAORDINARIA

- Convocatoria extraordinaria: los alumnos que no hayan superado la asignatura en la convocatoria ordinaria deberán examinarse de aquellas partes no superadas.

HORARIOS DE ATENCIÓN

Contactar con:

Prof. Gustavo González Gaitano (gaitano@unav.es)

Edificio de Investigación, despacho 1-171

BIBLIOGRAFÍA

Manuales

1. Atkins P. W. "Química Física". 8ª edición. Ed. Médica Panamericana: 2008 Localízalo en la Biblioteca

2. Levine I. N. "Fisicoquímica (2º vol.)". 5ª edición. Ed. Mc Graw-Hill: 2013 (Libro electrónico) Localízalo en la Biblioteca

3. Engel, T.; Reid, P. "Química Física". Ed. Addison-Wesley: 2006 (Libro electrónico) Localízalo en la Biblioteca

4. McQuarrie, D. A.; Simon, J.D. "Physical Chemistry. A molecular approach". Ed. University Science Books: 1997 Localízalo en la Biblioteca

5. Levine, I.N. "Química Cuántica". 5ª edición. Prentice Hall: 2001 Localízalo en la Biblioteca

6. Bertrán Rusca, J.; Núñez Delgado J. "Química física I y II". Ed. Ariel Ciencia: 2002 Localízalo en la Biblioteca

7. Castellan G. W. "Fisicoquímica". Ed. Addison-Wesley Iberoamericana: 1987 Localízalo en la Biblioteca

Recursos electrónicos

Universidad de Navarra

1. ATKINS ("Physical Chemistry 11ed"): https://oup-arc.com/access/pchem11e-student-resources

2. Applets de Java: http://www.falstad.com/mathphysics.html

3. Mathworld: http://mathworld.wolfram.com

4. The Wolfram Integrator: http://integrals.wolfram.com

5. Orbital Viewer, v3.1 (© David Mantley, 2004), http://www.orbitals.com

7. Relación de páginas web de interés actualizada e incluida en AulaVirtual