



DATOS IDENTIFICATIVOS

Química física II

Asignatura	Química física II			
Código	V11G200V01403			
Titulación	Grado en Química			
Descriptores	Creditos ECTS	Seleccione	Curso	Cuatrimestre
	9	OB	2	2c
Lengua	Castellano			
Impartición	Gallego			
Departamento	Química Física			
Coordinador/a	Mosquera Castro, Ricardo Antonio Fernández Nóvoa, Alejandro			
Profesorado	Fernández Nóvoa, Alejandro Gómez Graña, Sergio Mosquera Castro, Ricardo Antonio Pastoriza Santos, Isabel Pérez Juste, Jorge			
Correo-e	mosquera@uvigo.es afnovo@uvigo.es			
Web				
Descripción general	Aplicación de los principios y métodos de la Mecánica Cuántica al estudio de la estructura molecular y la espectroscopia.			

Competencias

Código	
C3	Demostrar conocimiento y comprensión de hechos esenciales, conceptos, principios y teorías en: principios de la mecánica cuántica y su aplicación en la descripción de la estructura y las propiedades de átomos y moléculas
C6	Demostrar conocimiento y comprensión de hechos esenciales, conceptos, principios y teorías en: principios de termodinámica y sus aplicaciones en Química
C8	Demostrar conocimiento y comprensión de hechos esenciales, conceptos, principios y teorías en: principales técnicas de investigación estructural, incluyendo la espectroscopia
C19	Aplicar dicho conocimiento y comprensión a la resolución de problemas cuantitativos y cualitativos de naturaleza básica
C20	Evaluar, interpretar y sintetizar datos e información química
C21	Reconocer e implementar buenas prácticas científicas de medida y experimentación
C22	Procesar datos y realizar cálculo computacional relativo a información y datos químicos
C23	Presentar material y argumentos científicos de manera oral y escrita a una audiencia especializada
C27	Monitorizar, mediante observación y medida de propiedades físicas y químicas, sucesos o cambios y documentarlos y registrarlos de manera sistemática y fiable
C28	Interpretar datos derivados de las observaciones y mediciones del laboratorio en términos de su significado y relacionarlos con la teoría adecuada
C29	Demostrar habilidades para los cálculos numéricos y la interpretación de los datos experimentais, con especial énfasis en la precisión y la exactitud
D1	Comunicarse de forma oral y escrita en al menos una de las lenguas oficiales de la Universidad
D3	Aprender de forma autónoma
D4	Buscar y gestionar información procedente de distintas fuentes
D5	Utilizar las tecnologías de la información y de las comunicaciones y manejar herramientas informáticas básicas
D6	Manejar las matemáticas, incluyendo aspectos tales como análisis de errores, estimaciones de órdenes de magnitud, uso correcto de unidades y modos de presentación de datos
D7	Aplicar los conocimientos teóricos a la práctica
D8	Trabajar en equipo
D9	Trabajar de forma autónoma
D12	Planificar y gestionar adecuadamente el tiempo
D13	Tomar decisiones
D14	Analizar y sintetizar información y obtener conclusiones

Resultados de aprendizaje		
Resultados previstos en la materia	Resultados de Formación y Aprendizaje	
Formular hamiltonianos moleculares, utilizar sobre ellos la aproximación de Born-Oppenheimer y discutir sus consecuencias.	C3 C20 C22 C23	D1 D3 D4 D5 D6 D7 D9 D12 D13 D14
Manejar superficies y perfiles de energía potencial y los conceptos relativos a ellas.	C3 C19 C20 C22 C28 C29	D1 D3 D4 D5 D6 D7 D9 D12 D13 D14
Aplicar los métodos OM y EV para la descripción del enlace químico en sistemas simples y conocer (con su origen) las limitaciones de estos métodos.	C3 C8 C19 C20 C21 C22 C23 C27 C28 C29	D1 D3 D4 D5 D6 D7 D9 D12 D13 D14 D15
Describir las técnicas de localización orbital y el fundamento de la hibridación de orbitales atómicos.	C3	D1 D3 D4 D6 D9
Aplicar (conociendo fundamentos y limitaciones) los principales métodos de cálculo para el estudio de estructuras moleculares (HF, DFT, post-HF).	C3 C19 C20 C22 C23 C28 C29	D1 D3 D4 D5 D6 D7 D9 D12 D13 D14
Describir las formas de interacción radiación-materia y formular reglas de selección de dipolo eléctrico.	C8	D1 D3 D4 D6 D9
Vincular la frecuencia de la radiación con el movimiento molecular responsable de una transición espectroscópica.	C8	D1 D3 D4 D6 D7 D9
Justificar el ensanchamiento de las líneas espectrales y el efecto del medio sobre los espectros.	C8	D1 D3 D4 D6 D9

Interpretar espectros de rotación y vibración-rotación para obtener información estructural, haciendo uso de los modelos cuánticos simples (rotor rígido y flexible y osciladores armónico y anarmónico), reglas de selección y técnicas de asignación de líneas.	C3 C8 C19 C20 C22 C23 C27 C28 C29	D1 D3 D4 D5 D6 D7 D9 D12 D13 D14
Discutir el principio de Franck-Condon y sus consecuencias.	C3 C8	D1 D3 D4 D6 D9
Interpretar espectros electrónicos y fotoelectrónicos, determinando información estructural a partir de ellos, y conocer sus fundamentos.	C3 C8 C19 C22	D1 D3 D4 D5 D6 D7 D9
Describir los diferentes procesos de desactivación de estados electrónicos excitados y representarlos en un diagrama de Jablonski.	C8 C19	D1 D3 D4 D6 D9
Describir los fundamentos de las espectroscopias de resonancia magnética e interpretar el origen físico del desplazamiento químico y de los acoplamientos presentes en los espectros de RMN.	C8 C19 C22	D1 D3 D4 D6 D9
Describir las peculiaridades instrumentales de las técnicas espectroscópicas en las diferentes regiones espectrales, así como los fundamentos y aplicaciones del láser y de las técnicas basadas en la transformada de Fourier.	C8	D1 D3 D4 D6 D9
Aplicar los conocimientos teóricos adquiridos en Química Física I para determinar experimentalmente constantes de equilibrio químico, coeficientes de actividad y magnitudes termoquímicas.	C6 C19 C20 C21 C23 C27 C28 C29	D1 D3 D4 D5 D6 D7 D8 D9 D12 D13 D14 D15

Nueva

Contenidos

Tema

Introducción a la teoría de grupos de simetría en química	- Elementos y operaciones de simetría. - Grupos puntuales de simetría. - Representaciones matriciales. - Representaciones irreducibles. Tablas de caracteres. - Aplicaciones químicas.
Aspectos cualitativos de la estructura electrónica molecular.	- Aproximación de Born-Oppenheimer. - Molécula H ₂ ⁺ . - Método OM para moléculas diatómicas homo y heteronucleares. - Método OM en moléculas poliatómicas. - Método EV.
Tratamientos cuantitativos para el estudio de la estructura electrónica molecular.	- Método Hartree-Fock. - Métodos post-Hartree-Fock. - Métodos semiempíricos. - Cálculo de propiedades moleculares

Introducción a la Espectroscopia Molecular.	<ul style="list-style-type: none"> - Interacción radiación-materia. Planteamiento general. - Integral momento dipolar de transición. Reglas de selección. - Intensidad y posición de las transiciones espectrales. - Instrumentación.
Espectroscopia de Rotación.	<ul style="list-style-type: none"> - Espectros de rotación pura de moléculas diatómicas. Modelos del rotor rígido y elástico. - Espectros de rotación pura de moléculas poliatómicas. - Espectros Raman de rotación pura. - Instrumentación y aplicaciones.
Espectroscopia de Vibración-rotación.	<ul style="list-style-type: none"> - Espectros de vibración-rotación de moléculas diatómicas. Modelos del oscilador armónico y anarmónico con rotación dependiente de la vibración. - Espectros de vibración-rotación de moléculas poliatómicas. - Espectroscopia Raman de vibración-rotación. - Instrumentación y aplicaciones.
Espectroscopia Electrónica.	<ul style="list-style-type: none"> - Estados electrónicos de las moléculas. - Estructura de vibración-rotación. Principio de Franck-Condon. - Grupos cromóforos y auxocromos. - Procesos de desactivación electrónica. - Instrumentación y aplicaciones. - Láseres. - Espectroscopia fotoelectrónica y relacionadas.
Espectroscopias de Resonancia.	<ul style="list-style-type: none"> - Introducción a la resonancia magnética. - Desplazamiento químico. - Interacción espín-espín. Constante de acoplamiento. - Espectroscopia de resonancia de espín electrónico.
Prácticas de Termodinámica Química (seis sesiones)	<ul style="list-style-type: none"> - Determinación experimental de constantes de equilibrio empleando técnicas espectrofotométricas o potenciométricas. - Determinación experimental de entalpías de combustión, disolución, neutralización, fusión o vaporización. - Propiedades coligativas. - Determinación experimental de coeficientes de actividad empleando una técnica potenciométrica.
Prácticas de Química Cuántica y Espectroscopia (seis sesiones).	<ul style="list-style-type: none"> - Estudio computacional de la estructura electrónica de diferentes moléculas - Estudio computacional de isomería conformacional. - Estudio computacional de procesos químicos simples. - Predicción, interpretación teórica y resolución del espectro de vibración-rotación del HCl en fase gas. - Espectroscopia electrónica: Espectro de la molécula de I₂ en fase gas.

Planificación

	Horas en clase	Horas fuera de clase	Horas totales
Lección magistral	26	39	65
Seminario	26	39	65
Prácticas de laboratorio	42	0	42
Resolución de problemas de forma autónoma	0	12	12
Examen de preguntas de desarrollo	4	8	12
Informe de prácticas	0	9	9
Resolución de problemas y/o ejercicios	4	8	12
Examen de preguntas objetivas	0	4	4
Práctica de laboratorio	1	3	4

*Los datos que aparecen en la tabla de planificación son de carácter orientativo, considerando la heterogeneidad de alumnado

Metodologías

	Descripción
Lección magistral	Consistirán en la exposición de los aspectos fundamentales de cada tema por parte del profesorado, tomando como base el material disponible en la plataforma TEM@ (esquemas, boletines de problemas, ...). Además de la exposición de temas, también se formularán problemas numéricos que ayuden a comprender y asentar los conceptos.
Seminario	Las clases de seminario serán principalmente labor del alumnado, bajo la supervisión del profesorado, y se emplearán fundamentalmente para: <ul style="list-style-type: none"> - Resolución de problemas, tanto de manera individual como en grupo. - Incidir, una vez el alumnado trabaje los aspectos básicos, sobre aquellos contenidos de cada tema que puedan presentar una mayor complejidad.

Prácticas de laboratorio	Realización bajo la supervisión del profesorado pero de manera autónoma, de prácticas de laboratorio o de química computacional. Las dichas prácticas se realizarán por parejas y en sesiones de 3,5 horas. Con la antelación suficiente, el alumnado dispondrá en la plataforma TEM@ de los guiones de las prácticas a realizar junto con todo el material adicional necesario. El guion presentará los elementos esenciales para realizar la práctica a nivel experimental o computacional, así como los puntos básicos de su fundamento teórico y del tratamiento de los datos. Al finalizar las prácticas, y dentro del plazo que fije el profesorado, será necesario entregar el informe de una de ellas, elaborado siguiendo las directrices dadas por el profesorado.
Resolución de problemas de forma autónoma	Para cada uno de los temas, se propondrán determinados "Problemas Evaluables" u otros trabajos que el alumnado deberá resolver o realizar para entregar al profesor en el plazo que se fije.

Atención personalizada

Metodologías	Descripción
Lección magistral	En el horario de tutorías del profesorado se resolverán de forma individualizada y más personal aquellas dudas del alumnado que puedan surgir al largo del curso en cualquiera de sus aspectos (clases de teoría o seminario, clases de laboratorio y los distintos tipos de actividades autónomas a realizar).
Seminario	En el horario de tutorías del profesorado se resolverán de forma individualizada y más personal aquellas dudas del alumnado que puedan surgir al largo del curso en cualquiera de sus aspectos (clases de teoría o seminario, clases de laboratorio y los distintos tipos de actividades autónomas a realizar).
Prácticas de laboratorio	En el horario de tutorías del profesorado se resolverán de forma individualizada y más personal aquellas dudas del alumnado que puedan surgir al largo del curso en cualquiera de sus aspectos (clases de teoría o seminario, clases de laboratorio y los distintos tipos de actividades autónomas a realizar).
Resolución de problemas de forma autónoma	En el horario de tutorías del profesorado se resolverán de forma individualizada y más personal aquellas dudas del alumnado que puedan surgir al largo del curso en cualquiera de sus aspectos (clases de teoría o seminario, clases de laboratorio y los distintos tipos de actividades autónomas a realizar).
Pruebas	Descripción
Examen de preguntas de desarrollo	En el horario de tutorías del profesorado se resolverán de forma individualizada y más personal aquellas dudas del alumnado que puedan surgir al largo del curso en cualquiera de sus aspectos (clases de teoría o seminario, clases de laboratorio y los distintos tipos de actividades autónomas a realizar).
Informe de prácticas	En el horario de tutorías del profesorado se resolverán de forma individualizada y más personal aquellas dudas del alumnado que puedan surgir al largo del curso en cualquiera de sus aspectos (clases de teoría o seminario, clases de laboratorio y los distintos tipos de actividades autónomas a realizar).
Resolución de problemas y/o ejercicios	En el horario de tutorías del profesorado se resolverán de forma individualizada y más personal aquellas dudas del alumnado que puedan surgir al largo del curso en cualquiera de sus aspectos (clases de teoría o seminario, clases de laboratorio y los distintos tipos de actividades autónomas a realizar).
Examen de preguntas objetivas	En el horario de tutorías del profesorado se resolverán de forma individualizada y más personal aquellas dudas del alumnado que puedan surgir al largo del curso en cualquiera de sus aspectos (clases de teoría o seminario, clases de laboratorio y los distintos tipos de actividades autónomas a realizar).
Práctica de laboratorio	En el horario de tutorías del profesorado se resolverán de forma individualizada y más personal aquellas dudas del alumnado que puedan surgir al largo del curso en cualquiera de sus aspectos (clases de teoría o seminario, clases de laboratorio y los distintos tipos de actividades autónomas a realizar).

Evaluación

Descripción	Calificación	Resultados de Formación y Aprendizaje
-------------	--------------	---------------------------------------

Prácticas de laboratorio	Se puntúan aquí junto con el esfuerzo y la actitud, las destrezas y las competencias desarrolladas por el alumnado durante la realización de las distintas prácticas.	ata 10,0	C3 C6 C8 C19 C20 C21 C22 C27 C28	D1 D4 D5 D6 D7 D8 D12 D13 D14 D15
Resolución de problemas de forma autónoma	Para cada uno de los temas o grupos de temas, se propondrán determinados "Problemas Evaluables" u otros trabajos que el alumnado deberá resolver o realizar.	ata 3,75	C3 C8 C19 C20 C22 C23	D1 D3 D4 D5 D6 D9 D12 D13 D14 D15
Examen de preguntas de desarrollo	Realización de una prueba escrita global al final del cuatrimestre, en la fecha como mínimo fijada por la Junta de Facultad.	33,75	C3 C8 C19 C20 C22	D1 D3 D6 D9 D12 D14 D15
Informe de prácticas	Se realizará el informe de una práctica propuesta por el profesorado que se deberá presentar cuidando los aspectos formales relativos a la organización, uso correcto de las unidades, confección correcta de las gráficas y exposición de los resultados. Se valorará también el análisis crítico de estos y la obtención de conclusiones. Además se evaluarán todas las prácticas realizadas mediante cuestiones orales que el alumnado podrá responder a la vista de su libreta de laboratorio.	ata 5,0	C3 C6 C8 C19 C20 C22 C23 C27 C28 C29	D1 D3 D4 D5 D6 D8 D9 D12 D14 D15
Resolución de problemas y/o ejercicios	Realización aproximadamente en la mitad del cuatrimestre, en la fecha fijadas por la Junta de Facultad, de una prueba escrita de carácter liberatorio.	ata 33,75	C3 C8 C19 C20 C22	D1 D3 D6 D9 D12 D14 D15
Examen de preguntas objetivas	Al finalizar cada tema o grupo de temas el alumnado tendrá, a través de la plataforma TEM@, la posibilidad de responder un "Test de Autoevaluación" autocorregible.	ata 3,75	C3 C8 C19	D3 D4 D6 D7 D9 D12 D14 D15
Práctica de laboratorio	Esta prueba escrita se realizará en la fecha fijada por la Xunta de Facultad y versará sobre los conocimientos y destrezas que el alumnado debe haber adquirido durante el desarrollo de las sesiones de prácticas. Las preguntas se situarán, en algunos casos, en el contexto de algunas de las experiencias realizadas por el alumnado y, en otros, tendrán un ámbito más general. A través de las dichas preguntas se evaluará su capacidad para resolver los problemas presentados.	ata 10,0	C3 C6 C8 C19 C21 C22 C28 C29	D1 D3 D4 D6 D7 D9 D12 D13 D14 D15

Otros comentarios sobre la Evaluación

La evaluación del curso tendrá en cuenta los aspectos mencionados mas arriba, distinguiendo entre la parte teórica y la parte práctica de la materia.

Parte Teórica:

Su evaluación supondrá, en su conjunto (pruebas (90%), resolución de problemas/trabajos (5%), test de autoevaluación (5%)), un 75% de la calificación final de la materia. Se realizarán 2 pruebas durante el cuatrimestre.

Superando la primera prueba, que se hará aproximadamente en la mitad del cuatrimestre, el estudiante podrá eliminar esos contenidos de la materia de la prueba final. La calificación de las pruebas será el promedio de las dos en el caso de superar la primera y no repetirla en la segunda. En el caso de no superar la primera, el alumno podrá repetirla en la prueba final. Para calcular la nota de las pruebas se utilizará la mejor de las 2 calificaciones de la primera parte de la materia.

Es requisito imprescindible para superar la materia obtener en la prueba ancha una calificación mínima de 4,0 sobre 10,0 puntos. En el caso de no alcanzar dicha puntuación la calificación que se reflejará en el acta será como máximo 4,0 puntos

Además, será necesario superar un promedio de 2,5 sobre 10,0 puntos en las cuestiones indicadas como teóricas en los exámenes. Si no se alcanzara esta puntuación la nota del acta no podrá superar 4,0.

Parte Práctica:

Su evaluación contribuirá, en su conjunto (prácticas de laboratorio (40%), informes y cuestiones orales(20%) y prueba escrita de prácticas (40%)), un 25% a la calificación final de la materia.

Es requisito imprescindible para superar la materia obtener en la parte práctica una calificación mínima de 5,0 sobre 10 puntos. En el caso de no alcanzar dicha puntuación la calificación que se reflejará en el acta no podrá superar 4,0.

La asistencia a las sesiones prácticas es obligatoria (se admitirán ausencias a sesiones debidamente justificadas) y, por tanto, no es posible aprobar la materia en el caso de no realizarlas.

Condición de presentado/en el presentado:

La realización de la prueba global, o la de la prueba escrita de prácticas, o la asistencia a más de cinco sesiones de laboratorio, implicará una condición de [presentado/la] y, por lo tanto, la asignación de una *calificación.

Segunda Oportunidad:

Para la evaluación de la segunda oportunidad, se mantendrán las calificaciones de problemas/trabajos propuestos, de las prácticas de laboratorio y de los correspondientes informes y test de autoevaluación. En el caso de tener una calificación igual o superior a 5,0 puntos en la parte teórica o igual o superior a 5,0 en la parte de prácticas, se mantendrá dicha calificación (y el porcentaje) y sólo habrá que realizar la otra.

Fuentes de información

Bibliografía Básica

Bibliografía Complementaria

BERTRÁN RUSCA, J.; NÚÑEZ DELGADO, J., "Química Física" (vol. I), 1ª edición,

BERTRÁN, J.; BRACHANDELL, V.; MORENO, M.; SODUPE, M., "Química Cuántica", 2ª edición,

ATKINS, P. W.; DE PAULA, J., **Química Física**, 8ª edición,

Recomendaciones

Asignaturas que se recomienda cursar simultáneamente

Herramientas informáticas y de comunicación en química/V11G200V01401

Métodos numéricos en química/V11G200V01402

Química inorgánica I/V11G200V01404

Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente

Física III/V11G200V01301

Química física I/V11G200V01303