



DATOS IDENTIFICATIVOS

Química física IV: Estructura molecular y espectroscopia

Asignatura	Química física IV: Estructura molecular y espectroscopia			
Código	V11G201V01307			
Titulación	Grado en Química			
Descriptores	Creditos ECTS	Seleccione	Curso	Cuatrimestre
	6	OB	3	2c
Lengua	Castellano			
Impartición	Gallego			
Departamento	Química Física			
Coordinador/a	Flores Rodríguez, Jesús Ramón			
Profesorado	Flores Rodríguez, Jesús Ramón Giráldez Martínez, Jesús Mandado Alonso, Marcos			
Correo-e	flores@uvigo.es			
Web	http://https://moovi.uvigo.gal/			
Descripción general	<p>Se aplica el Método Mecanocuántico al estudio de moléculas y se presentan los fundamentos teóricos de la Espectroscopia Molecular, así como diversos aspectos experimentales. Se introduce la aproximación de Born-Oppenheimer y se describen las superficies de energía potencial. De esta forma, puede abordarse el estudio de las espectroscopias de rotación y vibración-rotación. Se presentan también los métodos básicos para el estudio de la estructura electrónica (Orbitales Moleculares y Enlace de Valencia), lo que permite analizar la estructura electrónica de moléculas sencillas e introducir algunos conceptos fundamentales. Se dispone así de los elementos necesarios para estudiar las espectroscopias electrónicas y fotoelectrónicas, por ejemplo. Se introducen también los métodos computacionales fundamentales para el estudio de la estructura electrónica, proporcionándose, de este modo, algunos elementos básicos de la denominada Química Computacional. El desarrollo de los métodos espectroscópicos se completa con los fundamentos teóricos de las espectroscopias de resonancia magnética así como de otras técnicas. Se han presentado también, de forma sucinta, otros métodos espectroscópicos, incluyéndose algunos de los derivados del uso del láser. El planteamiento teórico de la asignatura descansa en los fundamentos de la Mecánica Cuántica, así como en el desarrollo de modelos para el tratamiento de la traslación, vibración y rotación, que se realiza en Química Física III: Química Cuántica. La introducción que se proporciona en dicha materia de la Teoría de Grupos aplicada a la simetría molecular, se completa en el primer tema de la presente. Se emplean elementos mecano-estadísticos para analizar, por ejemplo, la intensidad y la anchura/forma de las líneas espectrales. Por sus contenidos, tanto de carácter teórico como experimental, proporciona cierto apoyo al desarrollo de Química Física V: Cinética Química.</p>			

Resultados de Formación y Aprendizaje

Código	
A1	Que los estudiantes sepan aplicar sus 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
A5	Que los estudiantes hayan desarrollado aquellas habilidades de aprendizaje necesarias para emprender estudios posteriores con un alto grado de autonomía
B1	Capacidad de aprendizaje autónomo
B2	Capacidad de organización y planificación
B4	Capacidad de análisis y síntesis
C2	Emplear correctamente la terminología química, nomenclatura, conversiones y unidades
C4	Utilizar adecuadamente herramientas informáticas para obtener información, procesar datos, realizar cálculos computacionales y calcular propiedades de la materia
C14	Coñecer os principios da mecánica cuántica e a súa aplicación na descrición da estrutura e as súas propiedades de átomos e moléculas
C15	Conocer las principales técnicas de investigación estructural, incluyendo la espectroscopia
D1	Capacidad para resolver problemas

Resultados previstos en la materia

Resultados previstos en la materia	Resultados de Formación y Aprendizaje			
Aplicar la teoría de grupos de simetría en el contexto de la química	A1 A5		C4	D1
Formular hamiltonianos moleculares teniendo en cuenta la aproximación de Born-Oppenheimer y describir superficies de energía potencial.	A1 A5	B4	C2 C4 C14	D1
Describir los métodos OM y EV y aplicar el método OM a moléculas sencillas.	A1 A5	B1 B2 B4	C2 C4 C14	D1
Describir y aplicar numéricamente métodos de cálculo para la estructura electrónica molecular.	A1 A5	B1 B2 B4	C2 C4 C14	D1
Aplicar conceptos básicos de espectroscopia molecular.	A1 A5	B1 B2 B4	C2 C4 C14 C15	D1
Interpretar distintos tipos de espectros moleculares (microondas, infrarrojo y visible-ultravioleta) para obtener información estructural.	A1 A5	B1 B2 B4	C2 C4 C14 C15	D1
Describir los fundamentos de las espectroscopías de resonancia.	A1 A5	B1 B2 B4	C2 C4 C14 C15	D1

Contenidos

Tema	
Tema I. La Teoría de Grupos en Química.	<ol style="list-style-type: none">1. Representaciones matriciales.2. Tablas de caracteres. Degeneración.3. Funciones de base.4. Representación producto directo.5. Anulación de integrales.6. Combinaciones lineales adaptadas a simetría y operadores de proyección.7. Teoría de Grupos y Química Cuántica.
Tema II. Estructura electrónica molecular I.	<ol style="list-style-type: none">1. El hamiltoniano molecular: aproximación de Born-Oppenheimer.2. Superficies de energía potencial.3. La molécula-ión hidrógeno H₂⁺: método de orbitales moleculares (OM).4. La molécula de hidrógeno: método del enlace de valencia (EV).5. Comparación de los métodos OM y EV.6. Limitaciones de la aproximación de Born-Oppenheimer.
Tema III. Estructura electrónica molecular II.	<ol style="list-style-type: none">1. Configuraciones electrónicas y términos electrónicos en moléculas diatómicas.2. Efecto de la interacción espín-órbita.3. Densidad electrónica y polaridad de los enlaces.4. Tratamiento OM y EV en moléculas diatómicas.5. Moléculas poliatómicas : clasificación de los estados electrónicos.6. Aplicación del método OM a moléculas poliatómicas sencillas.7. Análisis de población electrónica.8. Localización de orbitales moleculares.9. Moléculas conjugadas: separación sigma-pi. Método OM del electrón libre.10. Método OM de Hückel.11. Deslocalización electrónica y aromaticidad.12. Aplicación del método EV a moléculas poliatómicas: tipos de hibridación.13. Resonancia.
Tema IV. Estructura electrónica y Química Computacional.	<ol style="list-style-type: none">1. El método Hartree-Fock SCF y su aplicación a moléculas.2. Funciones de base en cálculos moleculares.3. Ecuaciones de Roothaan-Hall y Pople-Nesbet.4. Limitaciones del método Hartree-Fock SCF.5. Métodos post-Hartree-Fock.6. Teoría del Funcional de la Densidad (DFT).7. La Relatividad en los cálculos moleculares.8. Métodos semi-empíricos.

Tema V. Interacción radiación electromagnética-materia y espectroscopía molecular.	<ol style="list-style-type: none"> 1. Interacción radiación electromagnética-materia. 2. Difusión de la radiación. 3. Absorción: Momentos de transición y reglas de selección. 4. La ley de Lambert-Beer. 5. Ensanchamiento de las líneas espectrales. 6. Efecto Raman. 7. Láser. 8. Transformada de Fourier. 9. Aspectos generales de las técnicas experimentales.
Tema VI. Rotación molecular y espectroscopias de rotación.	<ol style="list-style-type: none"> 1. El rotor rígido poliatómico: resultados del tratamiento clásico y cuántico. 2. Espectros de rotación pura. <ol style="list-style-type: none"> 2.1. Reglas de selección, poblaciones e intensidad de las líneas. 2.2. Efecto Stark. 2.3. Estructura hiperfina y momento cuadrupolar nuclear. 2.4. Moléculas con momento angular electrónico no nulo. 2.5. Desdoblamiento tipo I. 3. Espectroscopia de microondas (MW) y sus aplicaciones. 4. Espectros Raman de rotación. 5. Determinación de la geometría molecular a partir de las constantes de rotación. 6. Estadística de espín nuclear y estados de rotación.
Tema VII. Vibración molecular y espectroscopias de vibración.	<ol style="list-style-type: none"> 1. Vibración en moléculas diatómicas. 2. Anarmonicidad, interacción vibración-rotación y distorsión centrífuga. 3. Espectros de vibración y vibración-rotación en moléculas diatómicas. 4. Intensidad de las líneas e influencia del espín nuclear. 5. La vibración en moléculas poliatómicas. 6. Espectros de vibración y vibración-rotación en moléculas poliatómicas. 7. Análisis basado en la simetría: actividad IR y Raman. 8. Superficies energía potencial y anarmonicidad. 9. Modos normales con más de un mínimo.
Tema VIII. Espectros electrónicos.	<ol style="list-style-type: none"> 1. Espectros electrónicos. 2. Moléculas diatómicas. <ol style="list-style-type: none"> 2.1 Reglas de selección. 2.2 Principio de Franck-Condon y estructura fina. 2.3 Disociación y predisociación. 3. Espectros electrónicos en moléculas poliatómicas. 4. Fluorescencia y fosforescencia. 5. Transiciones no radiativas. 6. Espectroscopias fotoelectrónicas. 7. Moléculas ópticamente activas. 8. Técnicas láser.
Tema IX. Espectroscopias de resonancia.	<ol style="list-style-type: none"> 1. Introducción. 2. Fundamento de las espectroscopias RMN y RSE. RMN: desplazamiento químico. 3. Interpretación de las constantes de apantallamiento. 4. Interpretación de la estructura fina. 5. RMN y procesos de intercambio nuclear. 6. RMN para estado sólido. 7. Fundamento de las técnicas de pulso y relajación de espín. 8. Espectroscopia RSE: estructura hiperfina. 9. Espectroscopia de resonancia de cuadrupolo nuclear. 10. Espectroscopia Mössbauer.

Planificación

	Horas en clase	Horas fuera de clase	Horas totales
Lección magistral	23	57.6	80.6
Resolución de problemas	12	26.4	38.4
Prácticas de laboratorio	14	14	28
Examen de preguntas objetivas	2	0	2
Examen de preguntas objetivas	1	0	1

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

Metodologías

Descripción

Lección magistral	Exposición de los aspectos fundamentales de cada tema y planteamiento de aquellos que se van a desarrollar en las clases de seminario mediante la realización de ejercicios. Respuesta a las cuestiones puntuales que el alumnado plantee. Se proporcionará el material de estudio necesario para seguir las lecciones mediante la plataforma Moovi (Moodle).
Resolución de problemas	Resolución de problemas numéricos y cuestiones teóricas así como ejercicios de tipo test. Los problemas y cuestiones se resolverán, en principio, por parte del profesor, en los seminarios, con la participación del alumnado. Se analizarán e interpretarán los resultados. De forma voluntaria, los alumnos podrán resolver los ejercicios y presentarlos en el seminario, con ayuda del profesor y la participación de los demás alumnos. Podrán, también de forma voluntaria, presentar la resolución escrita de un ejercicio y debatirla con el profesor en el horario de tutoría
Prácticas de laboratorio	Se procurará que cada alumno realice un conjunto equilibrado de experiencias que ejemplifique y desarrolle los contenidos fundamentales. Se llevarán a cabo en parejas para una mayor agilidad en su desarrollo. Se proporcionarán guiones completos, referencias de material bibliográfico e instrucciones para el uso de los ordenadores, programas y aparatos, de ser necesario, así como relativas a la seguridad en el laboratorio. El alumno ha de elaborar las gráficas y hacer los cálculos necesarios para obtener los resultados finales, así como analizar y discutir los mismos.

Atención personalizada

Metodologías	Descripción
Lección magistral	El estudiante podrá plantear dudas puntuales en las sesiones así como otras más amplias en el horario de tutoría del profesor
Resolución de problemas	Se discutirá con los alumnos la resolución de los ejercicios propuestos y se analizarán los resultados obtenidos en conexión con el desarrollo de aspectos teóricos. Se responderá a las cuestiones adicionales que los estudiantes puedan plantear, en el horario de tutoría del profesor.
Prácticas de laboratorio	Se analizarán con el estudiante, durante las sesiones prácticas, las dudas o problemas que puedan surgir en lo referente a su fundamento teórico, a su desarrollo experimental y a los aspectos clave de los cálculos necesarios. Se abordarán cuestiones adicionales en el horario de tutorías.
Pruebas	Descripción
Examen de preguntas objetivas	Se aclararán las dudas que puedan surgir respecto de la celebración de las pruebas escritas, en particular las relativas a su alcance y configuración. Se procurará, en el caso de las pruebas cortas, discutir las soluciones a los ejercicios en la siguiente clase de seminario. En horario de tutoría se analizarán con el estudiante, a petición suya, las respuestas por él/ella dadas (revisión).

Evaluación

	Descripción	Calificación	Resultados de Formación y Aprendizaje
Resolución de problemas	Voluntaria. Se valorará la resolución por parte del alumno de ejercicios propuestos y su presentación en clases de seminario. Se realizarán también ejercicios de tipo test. El peso en la puntuación se sitúa entre los límites 0-10%.	10	A1 B1 C2 D1 A5 B2 C4 B4 C14 C15
Prácticas de laboratorio	Obligatorias. Se puntúan por la valoración de su desarrollo (5%) así como por la de los correspondientes informes de prácticas (15%), uno por cada práctica realizada. Éstos han de confeccionarse de forma individual, contener tablas, gráficas y los cálculos necesarios para la obtención de los resultados, así como un análisis de los mismos. Deben entregarse en el plazo que se establezca, a través de la plataforma Moovi.	20	A1 B1 C2 D1 A5 B2 C4 B4 C14 C15
Examen de preguntas objetivas	En lo que se refiere a las pruebas escritas, la materia se divide en dos partes (I y II) a las que corresponde un peso relativo del 50%. Consistirán en la resolución de cuestiones y problemas.	35	A1 B1 C2 D1 A5 B2 C14 B4 C15
	Primera Prueba Corta (Parte I). Voluntaria. Recuperable en el Examen. Tendrá lugar a mitad del periodo de clases, aproximadamente. Será liberatoria de la materia evaluada, solamente si se alcanza o supera la puntuación de 5 puntos sobre 10. De ser la puntuación inferior a 5 pero igual o superior a 3.75, representará el 50% de la nota de la parte I, correspondiendo el resto a la parte II del Examen, si ello conduce a una calificación más alta; de no ser así prevalece la nota de ésta última. Su peso en la nota global depende del resultado de otros apartados y se sitúa entre los límites: 0-40%.		

Examen de preguntas objetivas	<p>Segunda Prueba Corta/Examen</p> <p>Segunda Prueba Corta (Parte II). Voluntaria. Recuperable en el Examen. No es liberatoria; la calificación tiene utilidad para realizar media con la parte II del Examen, no de forma independiente. Tendrá lugar cerca del final del periodo de clases. Supondrá, en principio, un 25% de la calificación de la parte II, pero de no conducir a una media superior, prevalecerá la nota de la parte II del Examen. Su peso en la nota global depende del resultado de otros apartados y se sitúa entre los límites: 0-10%.</p> <p>Examen. Obligatorio. Se realizará al final del cuatrimestre, tras el periodo de clases (Mayo o Junio). Los estudiantes que no hayan superado la Primera Prueba Corta (no hayan obtenido una puntuación ≥ 5) deberán realizar todos los ejercicios propuestos. Aquellos que sí la hayan superado podrán realizar también, de forma voluntaria, los ejercicios correspondientes a la parte I para mejorar su calificación. Su peso en la nota global depende del resultado de otros apartados y se sitúa entre los límites: 26.25%-80%.</p> <p>La calificación combinada de las pruebas escritas (no se incluyen los test mencionados en el primer apartado) ha de ser al menos, 3.75 sobre 10 para que pueda superarse la asignatura. No puede superarse si no se realizan tanto las Prácticas de Laboratorio como el Examen. Véanse los puntos segundo y tercero del siguiente apartado.</p> <p>La evaluación de segunda oportunidad se describe en el primer punto del siguiente apartado.</p>	35	A1 B1 C2 D1 A5 B2 C14 B4 C15
-------------------------------	---	----	------------------------------------

Otros comentarios sobre la Evaluación

- En la *evaluación de segunda oportunidad* (finales de Junio o principios de Julio), los estudiantes que no superaron la asignatura en la primera, deberán realizar el correspondiente Examen, de lo contrario mantendrán la calificación de la primera oportunidad. La calificación global en segunda oportunidad no será inferior a la de la primera. Las Prácticas de Laboratorio tienen un peso del 20%. Se podrán tener en cuenta además, la puntuación correspondiente al apartado de Resolución de Problemas, a la segunda Prueba Corta y también la de la Primera Prueba Corta, en éste último caso solamente si es ≥ 3.75 , en las proporciones establecidas anteriormente, si ello da lugar a una nota combinada más alta (véase también siguiente apartado). De no ser así, la calificación del Examen, obtenida con todos los ejercicios, prevalece y representa el 80% de la calificación global.
- La calificación combinada de las pruebas escritas ha de ser al menos 3.75 sobre 10 para que pueda hacerse media con los otros apartados de la evaluación. La puntuación media global ha de ser de 5 puntos sobre 10 o superior para superar la asignatura. Tanto las Prácticas como el Examen son obligatorios.
- La realización de dos o más tests, o la presentación de uno o más ejercicios en clase de seminario (apartado de Resolución de Ejercicios), realización de práctica, o de cualquiera de las pruebas cortas, hace imposible que la calificación sea 'no presentado'.

Fuentes de información

Bibliografía Básica

Atkins, P.W.; de Paula, J.; Keeler, J., **Atkins Physical Chemistry**, 11th, Oxford University Press, 2018

Levine, I. N, **Physical Chemistry**, 6th ed., McGraw Hill, 2009

Bibliografía Complementaria

Levine, I. N, **Quantum Chemistry**, 7th, Pearson, 2014

Hollas, J.M., **Modern Spectroscopy**, 4th, Wiley, 2004

Levine, I.N., **Molecular Spectroscopy**, 1st ed., John Wiley & Sons, 1975

Banwell, C. N., **Fundamentals of Molecular Spectroscopy**, 4th, McGraw-Hill, 1994

Requena, A. ; Zúñiga, J., **Espectroscopía**, 1, Pearson, 2004

Gil Criado, M.; Núñez Barriocanal, J.L., **Espectroscopía Molecular**, 1, Garceta, 2018

Bernath, P.J., **Spectra of Atoms and Molecules**, 4th, Oxford University Press, 2020

Atkins, P. W. ; Friedman, R., **Molecular Quantum Mechanics**, 4th ed., Oxford University Press, 2005

Atkins, P. W., **Quanta : a handbook of concepts**, 2nd ed., Oxford University Press, 1991

Recomendaciones

Asignaturas que se recomienda cursar simultáneamente

Química física V: Cinética química/V11G201V01308

Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente

Química física I: Termodinámica química/V11G201V01203

Química física II: Superficies y coloides/V11G201V01208

Química física III: Química cuántica/V11G201V01303
