



DATOS IDENTIFICATIVOS

Química física II

Materia	Química física II			
Código	V11G200V01403			
Titulación	Grao en Química			
Descritores	Creditos ECTS	Sinale	Curso	Cuadrimestre
	9	OB	2	2c
Lingua de impartición	Castelán Galego			
Departamento	Química física			
Coordinador/a	Fernandez Novoa, Alejandro			
Profesorado	Fernandez Novoa, Alejandro Rodríguez Lorenzo, Laura Sanles Sobrido, Marcos			
Correo-e	afnovoa@uvigo.es			
Web				
Descrición xeral	Aplicación de los principios y métodos de la Mecánica Cuántica al estudio de la estructura molecular y la espectroscopía.			

Competencias de titulación

Código	
A3	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: principios da Mecánica Cuántica e a súa aplicación na descrición da estrutura e as propiedades de átomos e moléculas
A6	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: principios de Termodinámica e as súas aplicacións en Química
A8	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: principais técnicas de investigación estrutural, incluíndo a Espectroscopía
A19	Aplicar os coñecementos e a comprensión á resolución de problemas cuantitativos e cualitativos de natureza básica
A20	Avaliar, interpretar e sintetizar datos e información química
A21	Recoñecer e implementar boas prácticas científicas de medida e experimentación
A22	Procesar datos e realizar cálculo computacional relativo a información e datos químicos
A27	Monitorizar, mediante observación e medida de propiedades físicas e químicas, acontecementos ou cambios e documentalos e rexistralos de xeito sistemático e fiable
A28	Interpretar datos derivados das observacións e medicións do laboratorio en termos do seu significado e relacionalos coa teoría adecuada
A29	Demostrar habilidades para os cálculos numéricos e a interpretación dos datos experimentais, con especial énfase na precisión e a exactitude

Competencias de materia

Resultados previstos na materia	Resultados de Formación e Aprendizaxe
Formular hamiltonianos moleculares, utilizar sobre ellos la aproximación de Born-Oppenheimer y discutir sus consecuencias.	A3 A19
Manejar superficies y perfiles de energía potencial y los conceptos relativos a ellas.	A3
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.	A19
Describir las técnicas de localización orbital y el fundamento de la hibridación de orbitales atómicos.	A3
Aplicar (conociendo fundamentos y limitaciones) los principales métodos de cálculo para el estudio de estructuras moleculares (HF, DFT, post-HF).	A3 A19 A20 A22
Describir las formas de interacción radiación-materia y formular reglas de selección de dipolo eléctrico.	A8

Vincular la frecuencia de la radiación con el movimiento molecular responsable de una transición espectroscópica.	A8
Justificar el ensanchamiento de las líneas espectrales y el efecto del medio sobre los espectros.	A8
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.	A3 A8 A19 A20 A22
Discutir el principio de Franck-Condon y sus consecuencias.	A3 A8
Interpretar espectros electrónicos y fotoelectrónicos, determinando información estructural a partir de ellos, y conocer sus fundamentos.	A3 A8 A19 A22
Describir los diferentes procesos de desactivación de estados electrónicos excitados y representarlos en un diagrama de Jablonski.	A8 A19
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.	A8 A19 A22
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.	A8
Aplicar los conocimientos teóricos adquiridos en Química Física I para determinar experimentalmente constantes de equilibrio químico, coeficientes de actividad y magnitudes termoquímicas.	A6 A19 A20 A21 A27 A28 A29

Contidos

Tema	
Estructura Electrónica das Moléculas Diatómicas.	- Aproximación de Born-Oppenheimer. - Método OM para a molécula H ₂ ⁺ . - Métodos OM e EV para a molécula H ₂ . - Método OM para moléculas diatómicas homo e heteronucleares.
Estructura Electrónica das Moléculas Poliatómicas.	- Método OM en moléculas poliatómicas. - Método de Hartree-Fock. Conxuntos base. - Outros métodos en Química Computacional.
Introducción á Espectroscopia Molecular.	- Interacción radiación-materia. Plantexamento xeral. - Integral momento dipolar de transición. Regras de selección. - Intensidade e forma das transicións espectrais.
Espectroscopia de Rotación.	- Espectros de rotación de moléculas diatómicas. Modelos do rotor ríxido e elástico. - Espectros de rotación de moléculas poliatómicas.
Espectroscopia de Vibración.	- Espectros de vibración de moléculas diatómicas. Modelos do oscilador harmónico e anharmónico. - Espectros de vibración-rotación de moléculas diatómicas. - Espectros de vibración de moléculas poliatómicas.
Espectroscopia Raman	- Mecanismo do efecto Raman. - Espectros Raman de rotación pura. - Espectros Raman de vibración de moléculas diatómicas e poliatómicas.
Espectroscopia Electrónica.	- Espectros electrónicos de moléculas diatómicas. - Estructura de vibración. Principio de Franck-Condon. - Estructura fina de rotación. - Espectros electrónicos de moléculas poliatómicas.
Espectroscopias de Resonancia.	- Introducción á resonancia magnética. - Desprazamento químico. - Interacción spin-spin. Constante de acoplamento. - Espectroscopia de resonancia de spin electrónico.
Prácticas de Termodinámica Química (seis sesións)	- Determinación de constantes de equilibrio empregando técnicas espectrofotométricas ou potenciométricas. - Determinación experimental de entalpías de combustión, disolución, neutralización ou vaporización. - Determinación experimental de coeficientes de actividade empregando unha técnica potenciométrica.

Prácticas de Química Cuántica e Espectroscopia (sete sesións).	<ul style="list-style-type: none"> - Estudio teórico da estrutura molecular das moléculas H₂ y H₂⁺. - Estudio teórico da estrutura molecular de outras moléculas diatómicas. - Isomería conformacional e rotación interna no n-butano. - Predicción, interpretación teórica e resolución do espectro de vibración-rotación do HCl en fase gas. - Espectroscopia electrónica: Espectro da molécula de I₂ en fase gas. - Determinación de barreiras de rotación por RMN.
--	--

Planificación

	Horas na aula	Horas fóra da aula	Horas totais
Sesión maxistral	26	49	75
Seminarios	13	37	50
Prácticas de laboratorio	45.5	4.5	50
Resolución de problemas e/ou exercicios de forma autónoma	0	10	10
Outros	2	4	6
Probos de resposta longa, de desenvolvemento	4	8	12
Informes/memorias de prácticas	0	9	9
Probos de resposta curta	2	4	6
Probos de tipo test	0	4	4
Probos prácticas, de execución de tarefas reais e/ou simuladas.	1	2	3

*Os datos que aparecen na táboa de planificación son de carácter orientador, considerando a heteroxeneidade do alumnado.

Metodoloxía docente

	Descrición
Sesión maxistral	Consistirán na exposición dos aspectos fundamentais de cada tema por parte do profesor, tomando como base o material disponible na plataforma TEM@ (esquemas, boletíns de problemas,...). Aparte da exposición de temas, tamén se plantexarán problemas numéricos que axuden a comprender e asentar os conceptos.
Seminarios	As clases de seminario serán principalmente labor do alumno, baixo a supervisión do profesor, e empregaranse fundamentalmente para: <ul style="list-style-type: none"> - Resolución de problemas, tanto de xeito individual como en grupo. - Incidir, unha vez o alumno traballe os aspectos básicos, sobre aqueles contidos de cada tema que poidan presentar unha maior complexidade. - Propoñer problemas/traballo para a súa resolución na casa, tanto de forma individual como en grupo.
Prácticas de laboratorio	Realización baixo a supervisión do profesor pero de xeito autónomo, de prácticas de laboratorio ou de química computacional. As devanditas prácticas realizaranse por parellas e en sesións de 3,5 horas. Coa antelación suficiente, os alumnos disporán na plataforma TEM@ dos guións das prácticas a realizar xunto con todo o material adicional necesario. O guión presentará os elementos esenciais para realizar a práctica a nivel experimental ou computacional, así como os puntos básicos do seu fundamento teórico e do tratamento dos datos. Ó rematar as prácticas, e dentro do prazo que fixe o profesor, será necesario entregar o correspondente informe/memoria.
Resolución de problemas e/ou exercicios de forma autónoma	Para cada un dos temas, propóranse determinados "Problemas Avaliables" ou outros traballos que o alumno deberá resolver ou realizar para entregar ao profesor (no prazo que se fixe), e que serán devoltos unha vez corrixidos.
Outros	

Atención personalizada

Metodoloxías	Descrición
Outros	No horario de titorías do profesor resolveranse de forma individualizada e máis persoal aquelas dúbidas dos alumnos que poidan xurdir ó longo do curso en calquera dos seus aspectos (clases de teoría ou seminario, clases de laboratorio e os distintos tipos de actividades autónomas a realizar).

Avaliación

	Descrición	Cualificación
Prácticas de laboratorio	Puntúanse aquí xunto co esforzo e a actitude, as destrezas e as competencias desenvolvidas polo alumno durante a realización das distintas prácticas. Este apartado supora como máximo 4,0 puntos da cualificación final máxima da parte experimental que será de 10 puntos.	ata 12,0

Resolución de problemas e/ou exercicios de forma autónoma	Para cada un dos temas, proporanse determinados "Problemas Avaliables" ou outros traballos que o alumno deberá resolver ou realizar. Estes problemas ou traballos no seu conxunto, suporán como máximo 1 punto da cualificación total final máxima da parte teórica que será de 10 puntos.	ata 7,0
Probas de resposta longa, de desenvolvemento	Realización dunha proba escrita global (3 horas de duración) ao final do cuadrimestre, na data fixada pola Xunta de Facultade, que suporá como máximo 6,0 puntos da cualificación total final máxima da parte teórica que será de 10 puntos. Para superar a materia é necesario superar neste exame unha cualificación mínima de 4,0 puntos sobre 10 puntos. No caso de non superar dita puntuación a calificación que se reflectirá na acta será únicamente a deste exame, non contabilizándose ningún dos demais apartados.	ata 4,2
Informes/memorias de prácticas	Teranse en conta os aspectos formais relativos á organización, uso correcto das unidades, confección correcta das gráficas e exposición dos resultados. Valorarase tamén a análise crítica destes e a obtención de conclusións. Este apartado supora como máximo 2,0 puntos da cualificación total final máxima da parte experimental que será de 10 puntos.	ata 6,0
Probas de resposta curta	Realización ao longo do cuadrimestre de dúas probas curtas (1 hora de duración) de carácter non liberatorio. Cada unha destas probas suporá como máximo 1 punto da cualificación total final máxima da parte teórica que será de 10 puntos.	ata 1,4
Probas de tipo test	Ó rematar cada tema o grupo de temas o alumno terá, a través de plataforma TEM@, a posibilidade de responder (un número limitado de veces) un "test de autoavaliación" autocorrixible. Estes test no seu conxunto, suporán como máximo 1 punto da cualificación total final máxima da parte teórica que será de 10 puntos.	ata 7,0
Probas prácticas, de execución de tarefas reais e/ou simuladas.	Esta proba escrita realizarase na data fixada pola Xunta de Facultade e versará sobre os coñecementos e destrezas que o alumno debe ter adquirido durante o desenvolvemento das sesións de prácticas. As preguntas situaranse, nalgúns casos, no contexto dalgúns das experiencias realizadas polo alumno e, noutros, terán un ámbito máis xeral. Avaliarase a súa capacidade de resolver os problemas presentados a través das devanditas preguntas. Este apartado supora como máximo 4,0 puntos da cualificación total final máxima da parte experimental que será de 10 puntos.	ata 12,0

Outros comentarios sobre a Avaliación

A avaliación do curso realizarase fundamentalmente dun xeito continuado tendo en conta os aspectos mencionados mais arriba, e distinguindo entre a parte teórica e a parte práctica da asignatura.

Parte Teórica:

A avaliación da **parte teórica** contribuirá, no seu conxunto (probas curtas (20%), proba longa (60%), resolución de problemas/traballos (10%), test de autoavaliación (10%)), un **70%** á cualificación final da materia. E **requisito imprescindible para superar a materia** obter na **proba longa** unha **cualificación mínima de 4,0 sobre 10,0 puntos**. No caso de non acadar dita puntuación a cualificación que se reflectirá na acta será únicamente o 75% da cualificación deste exame, non contabilizándose ningún dos demais apartados.

Parte Práctica:

A avaliación da **parte práctica** contribuirá, no seu conxunto (prácticas de laboratorio (40%), informes (20%) e examen (40%)), un **30%** á cualificación final da materia. E **requisito imprescindible para superar a materia** obter, na **parte práctica**, unha **cualificación mínima de 5,0 sobre 10 puntos**. No caso de non acadar dita puntuación a cualificación que se reflectirá na acta será unicamente a do 75% desta parte práctica (no caso de terse superada a cualificación mínima de 4,0 puntos na proba longa).

A asistencia ás sesións prácticas é obrigatoria e, polo tanto, non é posible aprobar a materia no caso de non terse realizado.

A realización das dúas probas curtas, ou da proba escrita de prácticas, ou da proba global ou a realización das prácticas de laboratorio, implicará a condición de presentado/a e, polo tanto, a asignación dunha cualificación.

Segunda Convocatoria:

Para a avaliación na segunda convocatoria, manteranse as cualificacións e as porcentaxes das probas curtas, dos problemas/traballos propostos, das prácticas de laboratorio e dos test de autoavaliación. No caso de ter unha cualificación igual o superior a 5,0 puntos na proba global (longa) ou na proba escrita de prácticas, manterase dita cualificación (e a porcentaxe) e só será necesario realizar a outra.

Se o profesor o estima oportuno, tamén poderá ser necesaria a repetición do informe/memoria das prácticas.

Bibliografía. Fontes de información

LEVINE, I. N., "Fisicoquímica" (vol. II), 5ª edición,

ENGEL, T.; REID, P., "Química Física", 1ª edición,

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

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

Bibliografía Complementaria:

□ ATKINS P. W., DE PAULA J., "Química Física" (8ª Edición). Editorial Médica Panamericana. (2008).

□ DÍAZ PEÑA M., ROIG MUNTANER A., "Química Física" (vol. I), Editorial Alhambra (1980).

□ LEVINE I.N., "Química Cuántica" (5ª ed.), Editorial Prencice Hall (2001).

□ REQUENA A., ZÚÑIGA J., "Espectroscopía", Editorial Pearson Prentice Hall (2004).

□ BANWELL C.N., Mc CASH E., "Fundamentals of Molecular Spectroscopy", Editorial McGraw-Hill (1994).

□ CARBALLEIRA OCAÑA L., PÉREZ JUSTE I., "Problemas de Espectroscopía Molecular", Editorial Netbiblo (2008).

□ LABOWITZ L.C., ARENTS J.S., "Fisicoquímica: Problemas y Soluciones", Editorial AC (1974).

□ GARLAND C.W., NIBLER J.W., SHOEMAKER D.P., "Experiments in Physical Chemistry" (7ª ed.), McGraw-Hill (2003)

□ FORESMAN J.B., FRISH A., "Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods: a guide to using Gaussian" (2ª ed.), Gaussian Inc (1996).

Recomendacións

Materias que se recomenda cursar simultaneamente

Ferramentas informáticas e de comunicación en química/V11G200V01401

Métodos numéricos en química/V11G200V01402

Química inorgánica I/V11G200V01404

Materias que se recomenda ter cursado previamente

Matemáticas: Matemáticas I/V11G200V01104

Matemáticas: Matemáticas II/V11G200V01203

Física III/V11G200V01301

Química física I/V11G200V01303