



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 | 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 afnovoa@uvigo.es | | | |
| Web | | | | |
| Descrición xeral | Aplicación dos principios e métodos da Mecánica Cuántica ao estudo da estrutura molecular e a espectroscopia. | | | |

Competencias

| | |
|--------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Código | |
| C3 | 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 |
| C6 | Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: principios de Termodinámica e as súas aplicacións en Química |
| C8 | Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: principais técnicas de investigación estrutural, incluíndo a Espectroscopía |
| C19 | Aplicar os coñecementos e a comprensión á resolución de problemas cuantitativos e cualitativos de natureza básica |
| C20 | Avaliar, interpretar e sintetizar datos e información química |
| C21 | Recoñecer e implementar boas prácticas científicas de medida e experimentación |
| C22 | Procesar datos e realizar cálculo computacional relativo a información e datos químicos |
| C23 | Presentar material e argumentos científicos de xeito oral e escrita a unha audiencia especializada |
| C27 | Monitorizar, mediante observación e medida de propiedades físicas e químicas, acontecementos ou cambios e documentalos e rexistralos de xeito sistemático e fiable |
| C28 | Interpretar datos derivados das observacións e medicións do laboratorio en termos do seu significado e relacionalos coa teoría adecuada |
| C29 | Demostrar habilidades para os cálculos numéricos e a interpretación dos datos experimentais, con especial énfase na precisión e a exactitude |
| D1 | Comunicarse de forma oral e escrita en polo menos unha das linguas oficiais da Universidade |
| D3 | Aprender de forma autónoma |
| D4 | Procurar e administrar información procedente de distintas fontes |
| D5 | Utilizar as tecnoloxías da información e das comunicacións e manexar ferramentas informáticas básicas |
| D6 | Manexar as matemáticas, incluíndo aspectos tales como análise de erros, estimacións de ordes de magnitude, uso correcto de unidades e modos de presentación de datos |
| D7 | Aplicar os coñecementos teóricos á práctica |
| D8 | Traballar en equipo |
| D9 | Traballar de forma autónoma |
| D12 | Planificar e administrar adecuadamente o tempo |
| D13 | Tomar decisións |
| D14 | Analizar e sintetizar información e obter conclusións |
| D15 | Avaliar de modo crítico e construtivo o entorno e a si mesmo |

Resultados de aprendizaxe

| Resultados previstos na materia | Resultados de Formación e Aprendizaxe | |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------|
| Formular hamiltonianos moleculares, utilizar sobre eles a aproximación de Born-Oppenheimer e discutir as súas consecuencias. | C3 C20 C22 C23 | D1 D3 D4 D5 D6 D7 D9 D12 D13 D14 |
| Manexar superficies e perfís de enerxía potencial e os conceptos relativos a elas. | C3 C19 C20 C22 C28 C29 | D1 D3 D4 D5 D6 D7 D9 D12 D13 D14 |
| Aplicar os métodos OM e EV para a descrición da ligazón química en sistemas simples e coñecer (coa súa orixe) as limitacións destes métodos. | C3 C8 C19 C20 C21 C22 C23 C27 C28 C29 | D1 D3 D4 D5 D6 D7 D9 D12 D13 D14 D15 |
| Describir as técnicas de localización orbital e o fundamento da hibridación de orbitais atómicos. | C3 | D1 D3 D4 D6 D9 |
| Aplicar (coñecendo fundamentos e limitacións) os principais métodos de cálculo para o estudo de estruturas moleculares (HF, DFT, post-HF). | C3 C19 C20 C22 C23 C28 C29 | D1 D3 D4 D5 D6 D7 D9 D12 D13 D14 |
| Describir as formas de interacción radiación-materia e formular regras de selección de dipolo eléctrico. | C8 | D1 D3 D4 D6 D9 |
| Vincular a frecuencia da radiación co movemento molecular responsable dunha transición espectroscópica. | C8 | D1 D3 D4 D6 D7 D9 |
| Xustificar o ensanche das liñas espectrais e o efecto do medio sobre os espectros. | C8 | D1 D3 D4 D6 D9 |

| | | |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------|
| Interpretar espectros de rotación e vibración-rotación para obter información estrutural, facendo uso dos modelos cuánticos simples (rotor ríxido e flexible e osciladores harmónico e anarmónico), regras de selección e técnicas de asignación de liñas. | C3 C8 C19 C20 C22 C23 C27 C28 C29 | D1 D3 D4 D5 D6 D7 D9 D12 D13 D14 |
| Discutir o principio de Franck-Condon e as súas consecuencias. | C3 C8 | D1 D3 D4 D6 D9 |
| Interpretar espectros electrónicos e fotoelectrónicos, determinando información estrutural a partir deles, e coñecer os seus fundamentos. | C3 C8 C19 C22 | D1 D3 D4 D5 D6 D7 D9 |
| Describir os diferentes procesos de desactivación de estados electrónicos excitados e representalos nun diagrama de Jablonski. | C8 C19 | D1 D3 D4 D6 D9 |
| Describir os fundamentos das espectroscopias de resonancia magnética e interpretar a orixe física do desprazamento químico e dos axustes presentes nos espectros de RMN. | C8 C19 C22 | D1 D3 D4 D6 D9 |
| Describir as peculiaridades instrumentais das técnicas espectroscópicas nas diferentes rexións espectrais, así como os fundamentos e aplicacións do láser e das técnicas baseadas na transformada de Fourier. | C8 | D1 D3 D4 D6 D9 |
| Aplicar os coñecementos teóricos adquiridos en Química Física I para determinar dun xeito experimental constantes de equilibrio químico, coeficientes de actividade e magnitudes termoquímicas. | C6 C19 C20 C21 C23 C27 C28 C29 | D1 D3 D4 D5 D6 D7 D8 D9 D12 D13 D14 D15 |

Nova

Contidos

Tema

| | |
|-----------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Introdución á teoría de grupos de simetría en química | - Elementos e operacións de simetría. - Grupos puntuais de simetría. - Representacións matriciais. - Representacións irreducibles. Táboas de caracteres. - Aplicacións químicas. |
| Aspectos cualitativos da estrutura electrónica molecular. | - Aproximación de Born-Oppenheimer. - Molécula H ₂ ⁺ . - Método OM para moléculas diatómicas homo e heteronucleares. - Método OM en moléculas poliatómicas. - Método EV. |
| Tratamentos cuantitativos para o estudo da estrutura electrónica molecular. | - Método Hartree-Fock. - Métodos post-Hartree-Fock. - Métodos semiempíricos. - Cálculo de propiedades moleculares |

| | |
|----------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Introdución á Espectroscopia Molecular. | <ul style="list-style-type: none"> - Interacción radiación-materia. Formulación xeral. - Integral momento dipolar de transición. Regras de selección. - Intensidade e posición das transicións espectrais. - Instrumentación. |
| Espectroscopia de Rotación. | <ul style="list-style-type: none"> - Espectros de rotación pura de moléculas diatómicas. Modelos do rotor ríxido e elástico. - Espectros de rotación pura de moléculas poliatómicas. - Espectros Raman de rotación pura. - Instrumentación e aplicacións. |
| Espectroscopia de Vibración-rotación. | <ul style="list-style-type: none"> - Espectros de vibración-rotación de moléculas diatómicas. Modelos do oscilador harmónico e anarmónico con rotación dependente da vibración. - Espectros de vibración-rotación de moléculas poliatómicas. - Espectroscopia Raman de vibración-rotación. - Instrumentación e aplicacións. |
| Espectroscopia Electrónica. | <ul style="list-style-type: none"> - Estados electrónicos das moléculas. - Estrutura de vibración-rotación. Principio de Franck-Condon. - Grupos cromóforos e auxocromos. - Procesos de desactivación electrónica. - Instrumentación e aplicacións. - Láseres. - Espectroscopia fotoelectrónica e relacionadas. |
| Espectroscopias de Resonancia. | <ul style="list-style-type: none"> - Introdución á resonancia magnética. - Desprazamento químico. - Interacción espín-espín. Constante de acoplamento. - Espectroscopia de resonancia de espín electrónico. |
| Prácticas de Termodinámica Química (seis sesións) | <ul style="list-style-type: none"> - Determinación experimental de constantes de equilibrio empregando técnicas espectrofotométricas ou potenciométricas. - Determinación experimental de entalpías de combustión, disolución, neutralización, fusión ou vaporización. - Propiedades coligativas. - Determinación experimental de coeficientes de actividade empregando unha técnica potenciométrica. |
| Prácticas de Química Cuántica e Espectroscopia (seis sesións). | <ul style="list-style-type: none"> - Estudo computacional da estrutura electrónica de diferentes moléculas - Estudo computacional de isomería conformacional. - Estudo computacional de procesos químicos simples. - Predición, interpretación teórica e resolución do espectro de vibración-rotación do HCl en fase gas. - Espectroscopia electrónica: Espectro da molécula de I₂ en fase gas. |

Planificación

| | Horas na aula | Horas fóra da aula | Horas totais |
|-------------------------------------------|---------------|--------------------|--------------|
| Lección maxistral | 26 | 39 | 65 |
| Seminario | 26 | 39 | 65 |
| Prácticas de laboratorio | 42 | 0 | 42 |
| Resolución de problemas de forma autónoma | 0 | 12 | 12 |
| Exame de preguntas de desenvolvemento | 4 | 8 | 12 |
| Informe de prácticas | 0 | 9 | 9 |
| Resolución de problemas e/ou exercicios | 4 | 8 | 12 |
| Exame de preguntas obxectivas | 0 | 4 | 4 |
| Práctica de laboratorio | 1 | 3 | 4 |

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

Metodoloxía docente

| | Descrición |
|-------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Lección maxistral | Consistirán na exposición dos aspectos fundamentais de cada tema por parte do profesorado, tomando como base o material dispoñible na plataforma TEM@ (esquemas, boletíns de problemas, ...). Ademais da exposición de temas, tamén se formularán problemas numéricos que axuden a comprender e asentar os conceptos. |
| Seminario | As clases de seminario serán principalmente labor do alumnado, baixo a supervisión do profesorado, e empregaranse fundamentalmente para: <ul style="list-style-type: none"> - Resolución de problemas, tanto de maneira individual como en grupo. - Incidir, unha vez o alumnado traballe os aspectos básicos, sobre aqueles contidos de cada tema que poidan presentar unha maior complexidade. |

| | |
|-------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Prácticas de laboratorio | Realización baixo a supervisión do profesorado pero de maneira autónoma, de prácticas de laboratorio ou de química computacional. As ditas prácticas realizaranse por parellas e en sesións de 3,5 horas. Coa antelación suficiente, o alumnado disporá 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. Ao finalizar as prácticas, e dentro do prazo que fixe o profesorado, será necesario entregar o informe dunha delas, elaborado seguindo as directrices dadas polo profesorado. |
| Resolución de problemas de forma autónoma | Para cada un dos temas, proporanse determinados "Problemas Avaliables" ou outros traballos que o alumnado deberá resolver ou realizar para entregar ao profesorado no prazo que se fixe. |

Atención personalizada

| Metodoloxías | Descrición |
|-------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Lección maxistral | No horario de titorias do profesorado resolveranse de forma individualizada e máis persoal aquelas dúbidas do alumnado 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). |
| Seminario | No horario de titorias do profesorado resolveranse de forma individualizada e máis persoal aquelas dúbidas do alumnado 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). |
| Prácticas de laboratorio | No horario de titorias do profesorado resolveranse de forma individualizada e máis persoal aquelas dúbidas do alumnado 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). |
| Resolución de problemas de forma autónoma | No horario de titorias do profesorado resolveranse de forma individualizada e máis persoal aquelas dúbidas do alumnado 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). |
| Probas | Descrición |
| Exame de preguntas de desenvolvemento | No horario de titorias do profesorado resolveranse de forma individualizada e máis persoal aquelas dúbidas do alumnado 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). |
| Informe de prácticas | No horario de titorias do profesorado resolveranse de forma individualizada e máis persoal aquelas dúbidas do alumnado 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). |
| Resolución de problemas e/ou exercicios | No horario de titorias do profesorado resolveranse de forma individualizada e máis persoal aquelas dúbidas do alumnado 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). |
| Exame de preguntas obxectivas | No horario de titorias do profesorado resolveranse de forma individualizada e máis persoal aquelas dúbidas do alumnado 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). |
| Práctica de laboratorio | No horario de titorias do profesorado resolveranse de forma individualizada e máis persoal aquelas dúbidas do alumnado 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 | Resultados de Formación e Aprendizaxe |
|------------|---------------|---------------------------------------|
|------------|---------------|---------------------------------------|

| | | | | |
|-------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------|-----------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------|
| Prácticas de laboratorio | Puntúanse aquí xunto co esforzo e a actitude, as destrezas e as competencias desenvolvidas polo alumnado durante a realización das 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 un dos temas ou grupos de temas, proporanse determinados "Problemas Avaliables" ou outros traballos que o alumnado deberá resolver ou realizar. | ata 3,75 | C3 C8 C19 C20 C22 C23 | D1 D3 D4 D5 D6 D9 D12 D13 D14 D15 |
| Exame de preguntas de desenvolvemento | Realización dunha proba escrita global ao final do cuadrimestre, na data fixada pola Xunta de Facultade. | como mínimo 33,75 | C3 C8 C19 C20 C22 | D1 D3 D6 D9 D12 D14 D15 |
| Informe de prácticas | Realizarase o informe dunha práctica proposta polo profesorado que se deberá presentar coidando 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. Ademais avaliaranse todas as prácticas realizadas mediante cuestións orais que o alumnado poderán responder á vista do seu caderno de laboratorio. | ata 5,0 | C3 C6 C8 C19 C20 C22 C23 C27 C28 C29 | D1 D3 D4 D5 D6 D8 D9 D12 D14 |
| Resolución de problemas e/ou exercicios | Realización aproximadamente na metade do cuadrimestre, na data fixada pola Xunta de Facultade, dunha proba escrita de carácter liberatorio. | ata 33,75 | C3 C8 C19 C20 C22 | D1 D3 D6 D9 D12 D14 D15 |
| Exame de preguntas obxectivas | Ao finalizar cada tema ou grupo de temas o alumnado terá, a través da plataforma TEM@, a posibilidade de responder un "Test de Autoavaliación" autocorrexible. | ata 3,75 | C3 C8 C19 | D3 D4 D6 D7 D9 D12 D14 D15 |
| Práctica de laboratorio | Esta proba escrita realizarase na data fixada pola Xunta de Facultade e versará sobre os coñecementos e destrezas que o alumnado debe adquirir durante o desenvolvemento das sesións de prácticas. As preguntas situaranse, nalgúns casos, no contexto dalgunhas das experiencias realizadas polo alumnado e, noutros, terán un ámbito máis xeral. A través das devanditas preguntas avaliarase a súa capacidade para resolver os problemas presentados. | ata 10,0 | C3 C6 C8 C19 C21 C22 C28 C29 | D1 D3 D4 D6 D7 D9 D12 D13 D14 D15 |

Outros comentarios sobre a Avaliación

A avaliación do curso terá en conta os aspectos mencionados mais arriba, distinguindo entre a parte teórica e a parte práctica da materia.

Parte Teórica:

A súa avaliación suporará, no seu conxunto (probas (90%), resolución de problemas/traballos (5%), test de autoavaliación (5%)), un 75% da cualificación final da materia. Realizaranse 2 probas durante o curso.

Superando a primeira proba, que farase aproximadamente a metade do cuadrimestre, o estudante poderá eliminar eses contidos da materia da proba final. A calificación das probas será o promedio das dúas no caso de superar a primeira e non repetila na segunda. No caso de non superar a primeira, o alumno poderá repetila na proba final. Para calcular a nota das probas utilizarase a mellor das 2 calificacións da primeira parte da materia.

É requisito imprescindible para superar a materia obter na proba larga unha cualificación mínima de 4,0 sobre 10,0 puntos. No caso de non alcanzar dita puntuación a cualificación que se reflectirá na acta será como máximo 4,0 puntos.

Ademáis, será necesario superar un promedio de 2,5 sobre 10,0 puntos nas cuestións indicadas como teóricas nos exámes. Se non se acadase esta puntuación a nota da acta non poderá superar 4,0.

Parte Práctica:

A súa avaliación contribuirá, no seu conxunto (prácticas de laboratorio (40%), informes e cuestións orais(20%) e proba escrita de prácticas (40%)), un 25% á cualificación final da materia.

É requisito imprescindible para superar a materia obter na parte práctica unha cualificación mínima de 5,0 sobre 10 puntos. No caso de non alcanzar dita puntuación a cualificación que se reflectirá na acta non poderá superar 4,0.

A asistencia ás sesións prácticas é obrigatoria (admitiranse ausencias a sesións debidamente xustificadas) e, por tanto, non é posible aprobar a materia no caso de non realizalas.

Condición de presentado/no presentado:

A realización da proba global, ou a da proba escrita de prácticas, ou a asistencia a máis de cinco sesións de laboratorio, implicará a condición de presentado/a e, polo tanto, a asignación dunha calificación.

Segunda Oportunidade:

Para a avaliación da segunda oportunidade, manteranse as calificacións de problemas/traballos propostos, das prácticas de laboratorio e dos correspondentes informes e test de autoevaluación. No caso de ter unha calificación igual ou superior a 5,0 puntos na parte teórica ou igual ou superior a 5,0 na parte de prácticas, manterase dicha calificación (e a porcentaxe) e so cumprirá realizar a outra.

Bibliografía. Fontes 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,

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

Física III/V11G200V01301

Química física I/V11G200V01303