



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			
Profesorado	Graña Rodríguez, Ana María Hermida Ramón, José Manuel Mosquera Castro, Ricardo Antonio Pastoriza Santos, Isabel Peña Gallego, María de los Ángeles Pérez Juste, Ignacio			
Correo-e	mosquera@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 rexístralos 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 *espectrales 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 *espectrales, 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 *experimentalmente 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.	- Interacción radiación-materia. Formulación xeral. - Integral momento dipolar de transición. Regras de selección. - Intensidade e posición das transicións espectrais. - Instrumentación.
Espectroscopia de Rotación.	- 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.	- 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.	- 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.	- Introdución á resonancia magnética. - Desprazamento químico. - Interacción espín-espín. Constante de acoplamento. - Espectroscopia de resonancia de espín electrónico.
Prácticas de Termodinámica Química (seis sesións)	- 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 (sete sesións).	- 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
Sesión maxistral	26	39	65
Seminarios	26	39	65
Prácticas de laboratorio	45.5	4.5	50
Resolución de problemas e/ou exercicios de forma autónoma	0	10	10
Probas de resposta longa, de desenvolvemento	4	8	12
Informes/memorias de prácticas	0	9	9
Probas de resposta curta	2	5	7
Probas de tipo test	0	4	4
Probas 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 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.
Seminarios	As clases de seminario serán principalmente labor do alumno, baixo a supervisión do profesor, e empregaranse fundamentalmente para: - Resolución de problemas, tanto de maneira 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.

Prácticas de laboratorio	Realización baixo a supervisión do profesor 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, 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. Ao finalizar as prácticas, e dentro do prazo que fixe o profesor, será necesario entregar o correspondente informe, elaborado seguindo as directrices dadas polo profesor.
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 para entregar ao profesor no prazo que se fixe.

Atención personalizada

Metodoloxías	Descrición
Sesión maxistral	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).
Seminarios	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).
Prácticas de laboratorio	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).
Resolución de problemas e/ou exercicios de forma autónoma	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).
Probas	Descrición
Probas de resposta longa, de desenvolvemento	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).
Informes/memorias de prácticas	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).
Probas de resposta curta	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).
Probas de tipo test	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).
Probas prácticas, de execución de tarefas reais e/ou simuladas.	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	Resultados de Formación e Aprendizaxe
------------	---------------	---------------------------------------

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.	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 e/ou exercicios de forma autónoma	Para cada un dos temas ou grupos de temas, proporanse determinados "Problemas Avaliables" ou outros traballos que o alumno deberá resolver ou realizar.	ata 3,75	C3 C8 C19 C20 C22 C23	D1 D3 D4 D5 D6 D9 D12 D13 D14 D15
Probas de resposta longa, de desenvolvemento	Realización dunha proba escritura global ao final do cuadrimestre, na data fixada pola Xunta de Facultade.	como mínimo 52,5	C3 C8 C19 C20 C22	D1 D3 D6 D9 D12 D14 D15
Informes/memorias de prácticas	Realizarase o informe dunha práctica proposta polos profesores 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 os alumnos 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
Probas de resposta curta	Realización ao longo do cuadrimestre, nas datas fixadas pola Xunta de Facultade, de dúas probas curtas de carácter non liberatorio.	hasta 15	C3 C8 C19 C20 C22	D1 D3 D6 D9 D12 D14 D15
Probas de tipo test	Ao finalizar cada tema ou grupo de temas o alumno 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
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 adquirir 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. 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 suporá, no seu conxunto (probas curtas (20%), proba longa (70%), resolución de

problemas/traballos (5%), test de autoavaliación (5%)), un 75% da cualificación final 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 unicamente a cualificación deste exame, non contabilizándose ningún dos demais apartados.

Ademais, será necesario obter unha media de 3,0 nas cuestións indicadas como teóricas nos exames (probas curtas e longa). Se non se alcanzase esta puntuación a nota reflectida na 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/non presentado: A realización das dúas probas curtas, ou da proba escrita de prácticas, ou da proba longa ou a asistencia a mais de cinco sesións de laboratorio, implicará a condición de ☐presentado/a☐ e, por tanto, a asignación dunha cualificación.

Segunda Oportunidade: Para a avaliación na segunda oportunidade, manteranse as cualificacións e as porcentaxes das probas curtas, dos problemas/traballos propostos, das prácticas de laboratorio e os correspondentes informes e do test de autoavaliación. No caso de ter unha cualificación igual ou superior a 5,0 puntos na proba global (longa) ou igual ou superior a 4,0 na proba escrita de prácticas, manterase dita cualificación (e a porcentaxe) e só será necesario realizar a outra.

Bibliografía. Fontes de información

ATKINS, P. W.; DE PAULA, J., **Química Física**, 8ª 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., FRIEDMAN R.S., "Molecular Quantum Mechanics" (5ª Edición). Oxford University Press. (2011).

☐ LEVINE I.N., "Química Cuántica" (5ª ed.), Prentice Hall (2001).

☐ LEVINE I.N., "Quantum Chemistry" (7ª ed.), Pearson (2014).

☐ LEVINE I.N., "Fisicoquímica" (5ª ed.), McGraw Hill (2004).

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

Libros de problemas:

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

☐ LEVINE I.N., "Problemas de Fisicoquímica" (5ª ed.), McGraw Hill (2005).

Libros de prácticas:

☐ 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 recomienda ter cursado previamente

Matemáticas: Matemáticas I/V11G200V01104

Matemáticas: Matemáticas II/V11G200V01203

Física III/V11G200V01301

Química física I/V11G200V01303
