



## 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	Fernández Nóvoa, Alejandro			
Profesorado	Fernández Nóvoa, Alejandro Ferro Costas, David Hermida Ramón, José Manuel Pastoriza Santos, Isabel Peña Gallego, María de los Ángeles			
Correo-e	afnovoa@uvigo.es			
Web				
Descripción	Aplicación de los principios y métodos de la Mecánica Cuántica al estudio de la estructura molecular y la espectroscopia.			

## Competencias de titulación

Código	
A3	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
A6	Demostrar conocimiento y comprensión de hechos esenciales, conceptos, principios y teorías en: principios de termodinámica y sus aplicaciones en Química
A8	Demostrar conocimiento y comprensión de hechos esenciales, conceptos, principios y teorías en: principales técnicas de investigación estructural, incluyendo la espectroscopia
A19	Aplicar dicho conocimiento y comprensión a la resolución de problemas cuantitativos y cualitativos de naturaleza básica
A20	Evaluar, interpretar y sintetizar datos e información química
A21	Reconocer e implementar buenas prácticas científicas de medida y experimentación
A22	Procesar datos y realizar cálculo computacional relativo a información y datos químicos
A23	Presentar material y argumentos científicos de manera oral y escrita a una audiencia especializada
A27	Monitorizar, mediante observación y medida de propiedades físicas y químicas, sucesos o cambios y documentarlos y registrarlos de manera sistemática y fiable
A28	Interpretar datos derivados de las observaciones y mediciones del laboratorio en términos de su significado y relacionarlos con la teoría adecuada
A29	(*)Demostrar habilidades para os cálculos numéricos e a interpretación dos datos experimentais, con especial énfase na precisión e a exactitude
B1	Comunicarse de forma oral y escrita en al menos una de las lenguas oficiales de la Universidad
B3	Aprender de forma autónoma
B4	Buscar y gestionar información procedente de distintas fuentes
B5	Utilizar las tecnologías de la información y de las comunicaciones y manejar herramientas informáticas básicas
B6	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
B7	Aplicar los conocimientos teóricos a la práctica
B8	Trabajar en equipo
B9	Trabajar de forma autónoma
B12	Planificar y gestionar adecuadamente el tiempo
B13	Tomar decisiones
B14	Analizar y sintetizar información y obtener conclusiones
B15	Evaluar de modo crítico y constructivo su entorno y a sí mismo

**Competencias de materia**

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.	A3 A19	B1 B3 B4 B6 B9
Manejar superficies y perfiles de energía potencial y los conceptos relativos a ellas.	A3 A19 A20 A22 A28 A29	B1 B3 B4 B5 B6 B7 B9 B12 B13 B14
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	B1 B3 B4 B6 B7 B9
Describir las técnicas de localización orbital y el fundamento de la hibridación de orbitales atómicos.	A3	B1 B3 B4 B6 B9
Aplicar (conociendo fundamentos y limitaciones) los principales métodos de cálculo para el estudio de estructuras moleculares (HF, DFT, post-HF).	A3 A19 A20 A22 A23 A28 A29	B1 B3 B4 B5 B6 B7 B9 B12 B13 B14
Describir las formas de interacción radiación-materia y formular reglas de selección de dipolo eléctrico.	A8	B1 B3 B4 B6 B9
Vincular la frecuencia de la radiación con el movimiento molecular responsable de una transición espectroscópica.	A8	B1 B3 B4 B6 B7 B9
Justificar el ensanchamiento de las líneas espectrales y el efecto del medio sobre los espectros.	A8	B1 B3 B4 B6 B9
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 A23 A27 A28 A29	B1 B3 B4 B5 B6 B7 B9 B12 B13 B14

Discutir el principio de Franck-Condon y sus consecuencias.	A3 A8	B1 B3 B4 B6 B9
Interpretar espectros electrónicos y fotoelectrónicos, determinando información estructural a partir de ellos, y conocer sus fundamentos.	A3 A8 A19 A22	B1 B3 B4 B5 B6 B7 B9
Describir los diferentes procesos de desactivación de estados electrónicos excitados y representarlos en un diagrama de Jablonski.	A8 A19	B1 B3 B4 B6 B9
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	B1 B3 B4 B6 B9
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	B1 B3 B4 B6 B9
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 A23 A27 A28 A29	B1 B3 B4 B5 B6 B7 B8 B9 B12 B13 B14 B15

## Contenidos

Tema	
Estructura Electrónica de las Moléculas Diatómicas.	- Aproximación de Born-Oppenheimer. - Molécula H <sub>2</sub> <sup>+</sup> . Método OM. - Molécula H <sub>2</sub> . Métodos OM y EV. - Método OM para moléculas diatómicas homo y heteronucleares. - Método de Hartree-Fock. Conjuntos base.
Estructura Electrónica de las Moléculas Poliatómicas.	- Método OM en moléculas poliatómicas. - Métodos semiempíricos. Método de Hückel. - Cálculo de propiedades moleculares - Otros métodos en Química Computacional.
Introducción a la Espectroscopia Molecular.	- Interacción radiación-materia. Planteamiento general. - Integral momento dipolar de transición. Reglas de selección. - Intensidad y posición de las transiciones espectrales.
Espectroscopia de Rotación.	- Espectros de rotación pura de moléculas diatómicas. Modelos del rotor rígido y elástico. - Espectros de rotación pura de moléculas poliatómicas.
Espectroscopia de Vibración.	- Espectros de vibración de moléculas diatómicas. Modelos del oscilador armónico y anarmónico. - Espectros de vibración-rotación de moléculas diatómicas. - Espectros de vibración de moléculas poliatómicas. - Espectroscopia Raman.
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.	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Introducción a la resonancia magnética.</li> <li>- Desplazamiento químico.</li> <li>- Interacción espín-espín. Constante de acoplamiento.</li> <li>- Espectroscopia de resonancia de espín electrónico.</li> </ul>
Prácticas de Termodinámica Química (seis sesiones)	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Determinación experimental de constantes de equilibrio empleando técnicas espectrofotométricas o potenciométricas.</li> <li>- Determinación experimental de entalpías de combustión, disolución, neutralización, fusión o vaporización.</li> <li>- Propiedades coligativas.</li> <li>- Determinación experimental de coeficientes de actividad empleando una técnica potenciométrica.</li> </ul>
Prácticas de Química Cuántica y Espectroscopia (siete sesiones).	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Estudio teórico de la estructura molecular de las moléculas H<sub>2</sub> y H<sub>2</sub><sup>+</sup>.</li> <li>- Estudio teórico de la estructura molecular de otras moléculas diatómicas.</li> <li>- Isomería conformacional y rotación interna en el n-butano.</li> <li>- Predicción, interpretación teórica y resolución del espectro de vibración-rotación del HCl en fase gas.</li> <li>- Espectroscopia electrónica: Espectro de la molécula de I<sub>2</sub> en fase gas.</li> </ul>

### Planificación

	Horas en clase	Horas fuera de clase	Horas totales
Sesión magistral	26	39	65
Seminarios	26	39	65
Prácticas de laboratorio	45.5	4.5	50
Resolución de problemas y/o ejercicios de forma autónoma	0	10	10
Pruebas de respuesta larga, de desarrollo	4	8	12
Informes/memorias de prácticas	0	9	9
Pruebas de respuesta corta	2	5	7
Pruebas de tipo test	0	4	4
Pruebas prácticas, de ejecución de tareas reales y/o simuladas.	1	2	3

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

### Metodologías

	Descripción
Sesión magistral	Consistirán en la exposición de los aspectos fundamentales de cada tema por parte del profesor, 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.
Seminarios	Las clases de seminario serán principalmente labor del alumno, bajo la supervisión del profesor, y se emplearán fundamentalmente para: <ul style="list-style-type: none"> <li>- Resolución de problemas, tanto de manera individual como en grupo.</li> <li>- Incidir, una vez el alumno trabaje los aspectos básicos, sobre aquellos contenidos de cada tema que puedan presentar una mayor complejidad.</li> </ul>
Prácticas de laboratorio	Realización bajo la supervisión del profesor 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, los alumnos dispondrán 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 profesor, será necesario entregar el correspondiente informe, elaborado siguiendo las directrices dadas por el profesor.
Resolución de problemas y/o ejercicios de forma autónoma	Para cada uno de los temas, se propondrán determinados "Problemas Evaluables" u otros trabajos que el alumno deberá resolver o realizar para entregar al profesor en el plazo que se fije.

### Atención personalizada

Metodologías	Descripción
Sesión magistral	En el horario de tutorías del profesor se resolverán de forma individualizada y más personal aquellas dudas de los alumnos 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).

Seminarios	En el horario de tutorías del profesor se resolverán de forma individualizada y más personal aquellas dudas de los alumnos 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 profesor se resolverán de forma individualizada y más personal aquellas dudas de los alumnos 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 de forma autónoma	En el horario de tutorías del profesor se resolverán de forma individualizada y más personal aquellas dudas de los alumnos 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).
<b>Pruebas</b>	<b>Descripción</b>
Pruebas de respuesta larga, de desarrollo	En el horario de tutorías del profesor se resolverán de forma individualizada y más personal aquellas dudas de los alumnos 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).
Informes/memorias de prácticas	En el horario de tutorías del profesor se resolverán de forma individualizada y más personal aquellas dudas de los alumnos 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 de respuesta corta	En el horario de tutorías del profesor se resolverán de forma individualizada y más personal aquellas dudas de los alumnos 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 de tipo test	En el horario de tutorías del profesor se resolverán de forma individualizada y más personal aquellas dudas de los alumnos 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 prácticas, de ejecución de tareas reales y/o simuladas.	En el horario de tutorías del profesor se resolverán de forma individualizada y más personal aquellas dudas de los alumnos 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).

<b>Evaluación</b>		
	Descripción	Calificación
Prácticas de laboratorio	Se puntúan aquí junto con el esfuerzo y la actitud, las destrezas y las competencias desarrolladas por el alumno durante la realización de las distintas prácticas.	ata 12,0
Resolución de problemas y/o ejercicios de forma autónoma	Para cada uno de los temas, se propondrán determinados "Problemas Evaluables" u otros trabajos que el alumno deberá resolver o realizar.	ata 7,0
Pruebas de respuesta larga, de desarrollo	Realización de una prueba escritura global (3,5 horas de duración) al final del cuatrimestre, en la fecha fijada por la Junta de Facultad.	ata 42
Informes/memorias de prácticas	Se tendrán en cuenta 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.	ata 6,0
Pruebas de respuesta corta	Realización a lo largo del cuatrimestre, en las fechas fijadas por la Junta de Facultad, de dos pruebas cortas (aproximadamente 1,5 horas de duración) de carácter no liberatorio.	ata 14
Pruebas de tipo test	Al finalizar cada tema o grupo de temas el alumno tendrá, a través de la plataforma TEM@, la posibilidad de responder un "test de autoevaluación" autocorregible.	ata 7,0
Pruebas prácticas, de ejecución de tareas reales y/o simuladas.	Esta prueba escrita se realizará en la fecha fijada por la Xunta de Facultad y versará sobre los conocimientos y destrezas que el alumno 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 alumno y, en otros, tendrán un ámbito más general. A través de las dichas preguntas se evaluará su capacidad para resolver los problemas presentados.	ata 12,0

### **Otros comentarios sobre la Evaluación**

La evaluación del curso se realizará fundamentalmente de una manera continuada teniendo cuenta los aspectos mencionados mas arriba, y distinguiendo entre la parte teórica y la parte práctica de la asignatura.

### **Parte Teórica:**

La evaluación de la **parte teórica** contribuirá, en su conjunto (pruebas cortas (20%), prueba larga (60%), resolución de problemas/trabajos (10%), test de autoevaluación (10%)), un **70%** a la calificación final de la materia. Es requisito **imprescindible para superar la materia** obtener en la **prueba larga** 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 únicamente la calificación de este examen, no contabilizándose ninguno de los demás apartados.

### **Parte Práctica:**

La evaluación de la **parte práctica** contribuirá, en su conjunto (prácticas de laboratorio (40%), informes (20%) y prueba escrita de prácticas (40%)), un **30%** 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 será únicamente el 75% de esta parte práctica (en el caso de tenerse superada la calificación mínima de 4,0 puntos en la prueba larga).

La asistencia a las sesiones prácticas es obligatoria y, por lo tanto, no es posible aprobar la materia en el caso de no haberse realizado.

La realización de las dos pruebas cortas, o de la prueba escrita de prácticas, o de la prueba larga o la asistencia a mas de cinco sesiones de laboratorio, implicará la condición de presentado/a y, por lo tanto, la asignación de una calificación.

### **Segunda Oportunidad:**

Para la evaluación en la segunda oportunidad, se mantendrán las calificaciones y los porcentajes de las pruebas cortas, de los problemas/trabajos propuestos, de las prácticas de laboratorio y los correspondientes informes y de los test de autoevaluación. En el caso de tener una calificación igual o superior a 5,0 puntos en la prueba global (larga) o igual o superior a 4,0 en la prueba escrita de prácticas, se mantendrá dicha calificación (y el porcentaje) y solo será necesario realizar a otra.

---

### **Fuentes 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,

- ATKINS P. W., DE PAULA J., "Química Física" (8ª Edición). Editorial Médica \*Panamericana. (2008).
- LEVINE I.N., "Química Cuántica" (5ª ed.), Editorial Prentice Hall (2001).
- BANWELL C.N., Mc CASH E., "Fundamentals of Molecular Spectroscopy", Editorial McGraw-Hill (1994).
- LABOWITZ L.C., ARENTS J.S., "Fisicoquímica: Problemas y Soluciones", Editorial AC (1974).
- FORESMAN J.B., FRISH A., "Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods: a guide to using Gaussian" (2ª ed.), Gaussian Inc (1996).

---

### **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**

Matemáticas: Matemáticas I/V11G200V01104

Matemáticas: Matemáticas II/V11G200V01203

