



## 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<br>Galego                                                                                            |        |       |              |
| Departamento          | Química Física                                                                                                |        |       |              |
| Coordinador/a         | Fernández Nóvoa, Alejandro                                                                                    |        |       |              |
| Profesorado           | Estévez Valcárcel, Carlos Manuel<br>Fernández Nóvoa, Alejandro<br>Pastoriza Santos, Isabel                    |        |       |              |
| Correo-e              | afnovo@uvigo.es                                                                                               |        |       |              |
| Web                   |                                                                                                               |        |       |              |
| Descrición xeral      | Aplicación dos principios e métodos da Mecánica Cuántica ao estudo da estrutura molecular e a espectroscopia. |        |       |              |

## 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 Espectroscopia                                          |
| 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<br>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, post-HF, DFT, ...). | A3<br>A19<br>A20<br>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 elástico y osciladores armónico y anarmónico), reglas de selección y técnicas de asignación de líneas. | A3<br>A8<br>A19<br>A20<br>A22                |
| Discutir el principio de Franck-Condon y sus consecuencias.                                                                                                                                                                                                       | A3<br>A8                                     |
| Interpretar espectros electrónicos, determinando información estructural a partir de ellos, y conocer sus fundamentos.                                                                                                                                            | A3<br>A8<br>A19<br>A22                       |
| Describir los diferentes procesos de desactivación de estados electrónicos excitados.                                                                                                                                                                             | A8<br>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<br>A19<br>A22                             |
| Describir las peculiaridades instrumentales de las técnicas espectroscópicas en las diferentes regiones espectrales.                                                                                                                                              | A8                                           |
| Aplicar los conocimientos teóricos adquiridos en Química Física I para determinar experimentalmente constantes de equilibrio químico, coeficientes de actividad y magnitudes termoquímicas.                                                                       | A6<br>A19<br>A20<br>A21<br>A27<br>A28<br>A29 |

## Contidos

| Tema                                              |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        |
|---------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Estrutura Electrónica das Moléculas Diatómicas.   | - Aproximación de Born-Oppenheimer.<br>- Molécula H <sub>2</sub> <sup>+</sup> . Método OM.<br>- Molécula H <sub>2</sub> . Métodos OM e EV.<br>- Método OM para moléculas diatómicas homo e heteronucleares.<br>- Método de Hartree-Fock. Conjuntos base.                                                                                               |
| Estrutura Electrónica das Moléculas Poliatómicas. | - Método OM en moléculas poliatómicas.<br>- Métodos semiempíricos. Método de Hückel.<br>- Cálculo de propiedades moleculares<br>- Outros métodos en Química Computacional.                                                                                                                                                                             |
| Introdución á Espectroscopia Molecular.           | - Interacción radiación-materia. Plantexamento xeral.<br>- Integral momento dipolar de transición. Regras de selección.<br>- Intensidade e posición das transicións espectrais.                                                                                                                                                                        |
| Espectroscopia de Rotación.                       | - Espectros de rotación pura de moléculas diatómicas. Modelos do rotor ríxido e elástico.<br>- Espectros de rotación pura de moléculas poliatómicas.                                                                                                                                                                                                   |
| Espectroscopia de Vibración.                      | - Espectros de vibración de moléculas diatómicas. Modelos do oscilador harmónico e anarmónico.<br>- Espectros de vibración-rotación de moléculas diatómicas.<br>- Espectros de vibración de moléculas poliatómicas.<br>- Espectroscopia Raman.                                                                                                         |
| Espectroscopia Electrónica.                       | - Espectros electrónicos de moléculas diatómicas.<br>- Estrutura de vibración. Principio de Franck-Condon.<br>- Estrutura fina de rotación.<br>- Espectros electrónicos de moléculas poliatómicas.                                                                                                                                                     |
| Espectroscopias de Resonancia.                    | - Introdución á resonancia magnética.<br>- Desprazamento químico.<br>- Interacción espín-espín. Constante de acoplamento.<br>- Espectroscopia de resonancia de espín electrónico.                                                                                                                                                                      |
| Prácticas de Termodinámica Química (seis sesións) | - Determinación de constantes de equilibrio empregando técnicas espectrofotométricas ou potenciométricas.<br>- Determinación experimental de entalpías de combustión, disolución, neutralización ou vaporización.<br>- Propiedades coligativas.<br>- Determinación experimental de coeficientes de actividade empregando unha técnica potenciométrica. |

|                                                                |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |
|----------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Prácticas de Química Cuántica e Espectroscopia (sete sesións). | <ul style="list-style-type: none"> <li>- Estudo teórico da estrutura molecular das moléculas H<sub>2</sub> y H<sub>2</sub><sup>+</sup>.</li> <li>- Estudo teórico da estrutura molecular de outras moléculas diatómicas.</li> <li>- Isomería conformacional e rotación interna no n-butano.</li> <li>- Predicción, interpretación teórica e resolución do espectro de vibración-rotación do HCl en fase gas.</li> <li>- Espectroscopia electrónica: Espectro da molécula de I<sub>2</sub> en fase gas.</li> </ul> |
|----------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

## 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 asentarse 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"> <li>- Resolución de problemas, tanto de xeito individual como en grupo.</li> <li>- Incidir, unha vez o alumno traballe os aspectos básicos, sobre aqueles contidos de cada tema que poidan presentar unha maior complexidade.</li> <li>- Propoñer problemas/traballo para a súa resolución na casa, tanto de forma individual como en grupo.</li> </ul>                                                                                                                                            |
| 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. |
| Resolución de problemas e/ou exercicios de forma autónoma | Para cada un dos temas, propoñeranse 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 tutorías 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 tutorías 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 tutorías 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 titorias 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).                                                                                                                                                                                                                                                                                   |
| <b>Probas</b>                                                   | <b>Descrición</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |
| Probas de resposta longa, de desenvolvemento                    | No horario de titorias 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 titorias 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 titorias 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 titorias 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 titorias 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).                                                                                                                                                                                                                                                                                   |
|                                                                 |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |
| <b>Avaliación</b>                                               |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |
|                                                                 | <div>Descrición</div> <div>Cualificación</div>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          |
| Prácticas de laboratorio                                        | <div>Puntúanse aquí xunto co esforzo e a actitude, as destrezas e as competencias desenvolvidas polo alumno durante a realización das distintas prácticas.</div> <div>Este apartado supoñerá como máximo 4,0 puntos da cualificación final máxima da parte experimental que será de 10 puntos.</div> <div>ata 12,0</div>                                                                                                                                                                                                                                                                |
| Resolución de problemas e/ou exercicios de forma autónoma       | <div>Para cada un dos temas, propoñeranse determinados "Problemas Avaliables" ou outros traballos que o alumno deberá resolver ou realizar.</div> <div>Estos problemas ou traballos no seu conxunto, supoñerán como máximo 1 punto da cualificación total final máxima da parte teórica que será de 10 puntos.</div> <div>ata 7,0</div>                                                                                                                                                                                                                                                 |
| Probas de resposta longa, de desenvolvemento                    | <div>Realización dunha proba escrita global (3,5 horas de duración) ao final do cuadrimestre, na data fixada pola Xunta de Facultade, que supoñerá como máximo 6,0 puntos da cualificación total final máxima da parte teórica que será de 10 puntos.</div> <div>Para superar a materia é necesario acadar neste exame unha cualificación mínima de 4,0 puntos sobre 10 puntos. No caso de non superar dita puntuación a cualificación que se reflectirá na acta será únicamente a cualificación deste exame, non contabilizándose ningún dos demais apartados.</div> <div>ata 42</div> |
| Informes/memorias de prácticas                                  | <div>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.</div> <div>Este apartado supoñerá como máximo 2,0 puntos da cualificación final máxima da parte experimental que será de 10 puntos.</div> <div>ata 6,0</div>                                                                                                                                                                                       |
| Probas de resposta curta                                        | <div>Realización ao longo do cuadrimestre de dúas probas curtas (aproximadamente 1 hora de duración) de carácter non liberatorio.</div> <div>Cada unha destas probas supoñerá como máximo 1 punto da cualificación total final máxima da parte teórica que será de 10 puntos.</div> <div>ata 14</div>                                                                                                                                                                                                                                                                                   |
| Probas de tipo test                                             | <div>Ao rematar cada tema ou grupo de temas o alumno terá, a través da plataforma TEM@, a posibilidade de responder un "test de autoavaliación" autocorrixible.</div> <div>Estos test no seu conxunto, supoñerán como máximo 1 punto da cualificación total final máxima da parte teórica que será de 10 puntos.</div> <div>ata 7,0</div>                                                                                                                                                                                                                                               |

|                                                                 |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |          |
|-----------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------|
| 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. A través das devanditas preguntas avaliarase a súa capacidade para resolver os problemas presentados. | ata 12,0 |
|                                                                 | Este apartado supoñerá como máximo 4,0 puntos da cualificación final máxima da parte experimental que será de 10 puntos.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |          |

### 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 unicamente a 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 asistencia a mais de catro sesións de laboratorio, implicará a condición de ☐presentado/a☐ e, polo 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 dos 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

LEVINE, I. N., "Físicoquímica" (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 Prencice Hall (2001).

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

☐ LABOWITZ L.C., ARENTS J.S., "Físicoquímica: 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).

---

**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

---