



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	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				
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 Espectroscopía
A19	Aplicar os coñecementos e a comprensión á resolución de problemas cuantitativos e cualitativos de natureza básica
A20	Avaliar, interpretar e sintetizar datos e información química
A21	Recoñecer e implementar boas prácticas científicas de medida e experimentación
A22	Procesar datos e realizar cálculo computacional relativo a información e datos químicos
A23	Presentar material e argumentos científicos de xeito oral e escrita a unha audiencia especializada
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
B1	Comunicarse de forma oral e escrita en polo menos unha das linguas oficiais da Universidade
B3	Aprender de forma autónoma
B4	Procurar e administrar información procedente de distintas fontes
B5	Utilizar as tecnoloxías da información e das comunicacións e manexar ferramentas informáticas básicas
B6	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
B7	Aplicar os coñecementos teóricos á práctica
B8	Traballar en equipo
B9	Traballar de forma autónoma
B12	Planificar e administrar adecuadamente o tempo
B13	Tomar decisións
B14	Analizar e sintetizar información e obter conclusións
B15	Avaliar de modo crítico e construtivo o entorno e a si mesmo

Competencias de materia

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.	A3 A19	B1 B3 B4 B6 B9
Manexar superficies e perfís de enerxía potencial e os conceptos relativos a elas.	A3 A19 A20 A22 A28 A29	B1 B3 B4 B5 B6 B7 B9 B12 B13 B14
Aplicar os métodos OM e EV para a descrición do enlace químico en sistemas simples e coñecer (coa súa orixe) as limitacións destes métodos.	A19	B1 B3 B4 B6 B7 B9
Describir as técnicas de localización orbital e o fundamento da hibridación de orbitais atómicos.	A3	B1 B3 B4 B6 B9
Aplicar (coñecendo fundamentos e limitacións) os principais métodos de cálculo para o estudo de estruturas moleculares (HF, post-HF, DFT...).	A3 A19 A20 A22 A23 A28 A29	B1 B3 B4 B5 B6 B7 B9 B12 B13 B14
Describir as formas de interacción radiación-materia e formular regras de selección de dipolo eléctrico.	A8	B1 B3 B4 B6 B9
Vincular a frecuencia da radiación co movemento molecular responsable dunha transición espectroscópica.	A8	B1 B3 B4 B6 B7 B9
Xustificar o ensanchamento das liñas espectrais e o efecto do medio sobre os espectros.	A8	B1 B3 B4 B6 B9
Interpretar espectros de rotación e vibración-rotación para obter información estrutural, facendo uso dos modelos cuánticos simples (rotor ríxido e elástico e osciladores harmónico e anarmónico), regras de selección e técnicas de asignación de liñas.	A3 A8 A19 A20 A22 A23 A27 A28 A29	B1 B3 B4 B5 B6 B7 B9 B12 B13 B14

Discutir o principio de Franck-Condon e as súas consecuencias.	A3 A8	B1 B3 B4 B6 B9
Interpretar espectros electrónicos, determinando información estrutural a partir deles, e coñecer os seus fundamentos.	A3 A8 A19 A22	B1 B3 B4 B5 B6 B7 B9
Describir os diferentes procesos de desactivación de estados electrónicos excitados.	A8 A19	B1 B3 B4 B6 B9
Describir os fundamentos das espectroscopias de resonancia magnética e interpretar a orixe física do desprazamento químico e dos acoplamentos presentes nos espectros de RMN.	A8 A19 A22	B1 B3 B4 B6 B9
Describir as peculiaridades instrumentais das técnicas espectroscópicas nas diferentes rexións espectrais.	A8	B1 B3 B4 B6 B9
Aplicar os coñecementos teóricos adquiridos en Química Física I para determinar experimentalmente constantes de equilibrio químico, coeficientes de actividade e magnitudes termoquímicas.	A6 A19 A20 A21 A23 A27 A28 A29	B1 B3 B4 B5 B6 B7 B8 B9 B12 B13 B14 B15

Contidos

Tema

Estrutura Electrónica das Moléculas Diatómicas.	- Aproximación de Born-Oppenheimer. - Molécula H ₂ ⁺ . Método OM. - Molécula H ₂ . Métodos OM e EV. - Método OM para moléculas diatómicas homo e heteronucleares. - Método de Hartree-Fock. Conxuntos base.
Estrutura Electrónica das Moléculas Poliatómicas.	- Método OM en moléculas poliatómicas. - Métodos semiempíricos. Método de Hückel. - Cálculo de propiedades moleculares - Outros métodos en Química Computacional.
Introdución á Espectroscopia Molecular.	- Interacción radiación-materia. Plantexamento xeral. - Integral momento dipolar de transición. Regras de selección. - Intensidade e posición das transicións espectrais.
Espectroscopia de Rotación.	- Espectros de rotación pura de moléculas diatómicas. Modelos do rotor ríxido e elástico. - Espectros de rotación pura de moléculas poliatómicas.
Espectroscopia de Vibración.	- Espectros de vibración de moléculas diatómicas. Modelos do oscilador harmónico e anarmónico. - Espectros de vibración-rotación de moléculas diatómicas. - Espectros de vibración de moléculas poliatómicas. - Espectroscopia Raman.
Espectroscopia Electrónica.	- Espectros electrónicos de moléculas diatómicas. - Estrutura de vibración. Principio de Franck-Condon. - Estrutura fina de rotación. - Espectros electrónicos de moléculas poliatómicas.

Espectroscopias de Resonancia.	- Introducción 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 teórico da estrutura molecular das moléculas H₂ y H₂⁺. - Estudo teórico da estrutura molecular de outras moléculas diatómicas. - Isomería conformacional e rotación interna no n-butano. - Predicción, interpretación teórica e resolución do espectro de vibración-rotación do HCl en fase gas. - Espectroscopia electrónica: Espectro da molécula de I₂ en fase gas.

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 xeito individual como en grupo. - Incidir, unha vez o alumno traballe os aspectos básicos, sobre aqueles contidos de cada tema que poidan presentar unha maior complexidade.
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, elaborado seguindo as directrices dadas polo profesor.
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 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
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 12,0
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.	ata 7,0
Probas de resposta longa, de desenvolvemento	Realización dunha proba escrita global (3,5 horas de duración) ao final do cuadrimestre, na data fixada pola Xunta de Facultade.	ata 42
Informes/memorias de prácticas	Teranse en conta os aspectos formais relativos á organización, uso correcto das unidades, confección correcta das gráficas e exposición dos resultados. Valorarase tamén a análise crítica destes e a obtención de conclusións.	ata 6,0
Probas de resposta curta	Realización ao longo do cuadrimestre, nas datas fixadas pola Xunta de Facultade, de dúas probas curtas (aproximadamente 1,5 horas de duración) de carácter non liberatorio.	ata 14
Probas de tipo test	Ao rematar cada tema ou grupo de temas o alumno terá, a través da plataforma TEM@, a posibilidade de responder un "test de autoavaliación" autocorrigible.	ata 7,0
Probas prácticas, de execución de tarefas reais e/ou simuladas.	Esta proba escrita realizarase na data fixada pola Xunta de Facultade e versará sobre os coñecementos e destrezas que o alumno debe ter adquirido durante o desenvolvemento das sesións de prácticas. As preguntas situaranse, nalgúns casos, no contexto dalgúns das experiencias realizadas polo alumno e, noutros, terán un ámbito máis xeral. A través das devanditas preguntas avaliarase a súa capacidade para resolver os problemas presentados.	ata 12,0

Outros comentarios sobre a Avaliación

A avaliación do curso realizarase fundamentalmente dun xeito continuado tendo en conta os aspectos mencionados máis 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 proba escrita de prácticas (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 longa ou a asistencia a mais de cinco 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., "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).

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