



DATOS IDENTIFICATIVOS

Química física IV: Estrutura molecular y espectroscopia

Materia	Química física IV: Estrutura molecular y espectroscopia			
Código	V11G201V01307			
Titulación	Grao en Química			
Descritores	Creditos ECTS	Sinale	Curso	Cuadrimestre
	6	OB	3	2c
Lingua de impartición	Castelán Galego			
Departamento	Química Física			
Coordinador/a	Flores Rodríguez, Jesús Ramón			
Profesorado	Flores Rodríguez, Jesús Ramón Giráldez Martínez, Jesús Mandado Alonso, Marcos			
Correo-e	flores@uvigo.es			
Web	http://https://moovi.uvigo.gal/			
Descrición xeral	Aplicase o Método Mecanocuántico ao estudo de moléculas e preséntanse os fundamentos teóricos da Espectroscopia Molecular, así como diversos aspectos experimentais. Introdúcese a aproximación de Born-Oppenheimer e descríbense as superficies de enerxía potencial. Desta forma, pode abordarse o estudo das espectroscopias de rotación e vibración-rotación. Preséntanse tamén os métodos básicos para o estudo da estrutura electrónica (Orbitais Moleculares e Enlace de Valencia), o que permite analizar a estrutura electrónica de moléculas sinxelas e introducir algúns conceptos fundamentais. Dispónse así dos elementos necesarios para estudar as espectroscopias electrónicas e fotoelectrónicas, por exemplo. Introdúcense os métodos computacionais fundamentais para o estudo da estrutura electrónica, proporcionándose, deste xeito, algúns elementos básicos da denominada Química Computacional. O desenvolvemento dos métodos espectroscópicos complétase cos fundamentos teóricos das espectroscopias de resonancia magnética e outras técnicas. Presentáronse tamén, de forma sucinta, outros métodos espectroscópicos, incluíndose algúns dos derivados do uso do láser. A formulación teórica da materia descansa nos fundamentos da Mecánica Cuántica, así como no desenvolvemento de modelos para o tratamento da translación, vibración e rotación, que se realiza en Química Física III: Química Cuántica. A introdución que se proporciona na devandita materia da Teoría de Grupos aplicada á simetría molecular, complétase no primeiro tema da presente. Empréganse elementos mecánico-estadísticos para analizar, por exemplo, a intensidade e a anchura/forma das liñas espectrais. Polos seus contidos, tanto de carácter teórico como experimental, proporciona certo apoio ao desenvolvemento de Química Física V: Cinética Química.			

Resultados de Formación e Aprendizaxe

Código	
A1	Que os estudantes saiban aplicar os seus coñecementos ó seu traballo ou vocación dunha forma profesional e posúan as competencias que adoitan demostrarse por medio da elaboración e defensa de argumentos e a resolución de problemas dentro da súa área de estudo
A5	Que os estudantes desenvolvan aquelas habilidades de aprendizaxe necesarias para emprender estudos posteriores cun alto grao de autonomía
B1	Capacidade de aprendizaxe autónomo
B2	Capacidade de organización y planificación
B4	Capacidade de análise e síntese
C2	Empregar correctamente a terminoloxía química, nomenclatura, conversións e unidades
C4	Utilizar adecuadamente ferramentas informáticas para obter información, procesar datos, realizar cálculos computacionais e calcular propiedades da materia
C14	Coñecer os principios da mecánica cuántica e a súa aplicación na descrición da estrutura e as súas propiedades de átomos e moléculas
C15	Coñecer as principais técnicas de investigación estrutural, incluíndo a espectroscopia
D1	Capacidade para resolver problemas

Resultados previstos na materia				
Resultados previstos na materia	Resultados de Formación e Aprendizaxe			
Aplicar a teoría de grupos de simetría no contexto da química	A1 A5		C4	D1
Formular hamiltonianos moleculares tendo en conta a aproximación de Born-Oppenheimer e describir superficies de enerxía potencial.	A1 A5	B4	C2 C4 C14	D1
Describir los métodos OM y EV y aplicar el método OM a moléculas sencillas.	A1 A5	B1 B2 B4	C2 C4 C14	D1
Describir y aplicar numéricamente métodos de cálculo para la estructura electrónica molecular.	A1 A5	B1 B2 B4	C2 C4 C14	D1
Aplicar conceptos básicos de espectroscopia molecular.	A1 A5	B1 B2 B4	C2 C4 C14 C15	D1
Interpretar distintos tipos de espectros moleculares (microondas, infrarrojo y visible-ultravioleta) para obtener información estructural.	A1 A5	B1 B2 B4	C2 C4 C14 C15	D1
Describir los fundamentos de las espectroscopías de resonancia.	A1 A5	B1 B2 B4	C2 C4 C14 C15	D1

Contidos

Tema	
Tema I. La Teoría de Grupos en Química.	1. Representacións matriciales. 2. Táboas de caracteres. Dexeneración. 3. Funcións de base. 4. Representación produto directo. 5. Anulación de integrais. 6. Combinacións lineais adaptadas a simetría e operadores de proxección. 7. Teoría de Grupos e Química Cuántica.
Tema II. Estrutura electrónica molecular I.	1. O hamiltoniano molecular: aproximación de Born-Oppenheimer. 2. Superficies de enerxía potencial. 3. A molécula-ión hidrógeno H ₂ ⁺ : método de orbitais moleculares (OM). 4. A molécula de hidróxeno: método do enlace de valencia (EV). 5. Comparación dos métodos OM e EV. 6. Limitacións da aproximación de Born-Oppenheimer.
Tema III. Estructura electrónica molecular II.	1. Configuracións electrónicas y términos electrónicos en moléculas diatómicas. 2. Efecto da interacción espín-órbita. 3. Densidad electrónica y polaridad de los enlaces. 4. Tratamiento OM y EV en moléculas diatómicas. 5. Moléculas poliatómicas: clasificación de los estados electrónicos. 6. Aplicación del método OM a moléculas poliatómicas sencillas. 7. Análisis de población electrónica. 8. Localización de orbitales moleculares. 9. Moléculas conjugadas: separación sigma-pi. Método OM del electrón libre. 10. Método OM de Hückel. 11. Deslocalización electrónica y aromaticidade. 12. Aplicación del método EV: tipos de hibridación. 13. Resonancia.
Tema IV. Estrutura electrónica e Química Computacional.	1. O método Hartree-Fock SCF aplicado a moléculas. 2. Funcións de base en cálculos moleculares. 3. Ecuacións de Roothaan-Hall e Pople-Nesbet. 4. Limitacións do método Hartree-Fock SCF. 5. Métodos post-Hartree-Fock. 6. Teoría do Funcional da Densidade (DFT). 7. La Relatividad en cálculos moleculares. 8. Métodos semi-empíricos.

Tema V. Interacción radiación materia e espectroscopía molecular.

1. Interacción radiación electromagnética-materia.
2. Difusión da radiación.
3. Absorción: Momentos de transición e regras de selección.
4. A lei de Lambert-Beer.
5. Ensanche das liñas espectrales.
6. Efecto Raman.
7. Láser.
8. Transformada de Fourier.
9. Aspectos xerais das técnicas experimentais.

Tema VI. Rotación molecular e espectroscopias de rotación.

1. O rotor ríxido poliatómico: tratamento clásico e cuántico.
2. Espectros de rotación pura.
 - 2.1. Regras de selección, poboacións e intensidade de las líneas
 - 2.2. Efecto Stark.
 - 2.3. Estrutura hiperfina e momento cuadrupolar nuclear.
 - 2.4. Moléculas con momento angular electrónico non nulo.
 - 2.5. Desdobramento tipo I.
3. Espectroscopia de microondas (MW) e as súas aplicacións.
4. Espectros Raman de rotación.
5. Determinación da xeometría molecular a partir das constantes de rotación.
6. Estatística de espín nuclear e estados de rotación.

Tema VII. Vibración molecular e espectroscopias de vibración.

1. Vibración en moléculas diatómicas.
2. Anarmonicidade, interacción vibración-rotación e distorsión centrífuga.
3. Espectros de vibración e vibración-rotación en moléculas diatómicas.
4. Intensidade das liñas e influencia do espín nuclear.
5. A vibración en moléculas poliatómicas.
6. Espectros de vibración e vibración-rotación en moléculas poliatómicas.
7. Análise baseada na simetría: actividade IR e Raman.
8. Superficies enerxía potencial e anarmonicidade.
9. Modos normais con máis dun mínimo.

Tema VIII. Espectros electrónicos.

1. Espectros electrónicos.
2. Moléculas diatómicas.
 - 2.1 Regras de selección.
 - 2.2 Principio de Franck-Condon e estrutura fina.
 - 2.3 Disociación e predisociación.
3. Espectros electrónicos en moléculas poliatómicas.
4. Fluorescencia e fosforescencia.
5. Transicións non radiativas.
6. Espectroscopias fotoelectrónicas.
7. Moléculas ópticamente activas.
8. Técnicas láser.

Tema IX. Espectroscopias de resonancia.

1. Introducción.
2. Fundamento das espectroscopias RMN e RSE. RMN: desprazamento químico.
3. Interpretación das constantes de apantallamento.
4. Interpretación da estrutura fina.
5. RMN e procesos de intercambio nuclear.
6. RMN para estado sólido.
7. Fundamento das técnicas de pulso e relaxación de espín.
8. Espectroscopia RSE: estrutura hiperfina.
9. Espectroscopia de resonancia de cuadrípulo nuclear.
10. Espectroscopia Mössbauer.

Planificación

	Horas na aula	Horas fóra da aula	Horas totais
Lección maxistral	23	57.6	80.6
Resolución de problemas	12	26.4	38.4
Prácticas de laboratorio	14	14	28
Exame de preguntas obxectivas	2	0	2
Exame de preguntas obxectivas	1	0	1

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

Metodoloxía docente

Descrición

Lección maxistral	Exposición dos aspectos fundamentais de cada tema e formulación daqueles que van a desenvolverse nas clases de seminario mediante a realización de exercicios. Resposta ás cuestións puntuais que o alumnado expoña. Proporcionarase o material de estudo necesario para seguir as leccións mediante a plataforma Moovi (Moodle).
Resolución de problemas	Resolución de problemas numéricos e cuestións teóricas así como exercicios de tipo test. Os problemas e cuestións resolveranse, en principio, por parte do profesor, nos seminarios, coa participación do alumnado. Analizaranse e interpretaranse os resultados. De forma voluntaria, os alumnos poderán resolver os exercicios e presentalos no seminario, con axuda do profesor e a participación dos demais alumnos. Poderán, tamén de forma voluntaria, presentar a resolución escrita dun exercicio e debatela co profesor no horario de tutoría
Prácticas de laboratorio	Procurarase que cada alumno realice un conxunto equilibrado de experiencias que exemplifique e desenvolva os contidos fundamentais. Se levarán a cabo en parellas para unha maior axilidade no seu desenvolvemento. Proporcionaranse guións completos, referencias de material bibliográfico e instrucións para o uso dos computadores, programas e aparellos de ser necesario, así como relativas á seguridade no laboratorio. O alumno ha de elaborar as gráficas e facer os cálculos necesarios para obter os resultados finais, así como analizar e discutir os mesmos.

Atención personalizada

Metodoloxías	Descrición
Lección maxistral	O estudante poderá expor dúbidas puntuais nas sesións así como outras máis amplas no horario de tutoría do profesor
Resolución de problemas	Discutirase cos alumnos a resolución dos exercicios propostos e analizaranse os resultados obtidos en conexión co desenvolvemento de aspectos teóricos. Responderase as cuestións adicionais que os estudantes poidan expor, no horario de tutoría do profesor.
Prácticas de laboratorio	Analizaranse co estudante, durante as sesións prácticas, as dúbidas ou problemas que poidan xurdir no referente ao seu fundamento teórico, ao seu desenvolvemento experimental e aos aspectos cruce dos cálculos necesarios. Abordaranse cuestións adicionais no horario de tutorías.
Probas	Descrición
Exame de preguntas obxectivas	Aclararanse as dúbidas que poidan xurdir respecto da celebración das probas escritas, en particular as relativas ao seu alcance e configuración. Procurarase, no caso das probas curtas, discutir as solucións aos exercicios na seguinte clase de seminario. En horario de tutoría analizaranse co estudante, a petición súa, as respostas dadas por el/ela (revisión).

Avaliación

	Descrición	Cualificación	Resultados de Formación e Aprendizaxe
Resolución de problemas	Voluntaria. Valorarase a resolución por parte do alumno dos exercicios propostos e a súa presentación nas clases de seminario. Realizaranse tamén exercicios tipo test. O peso na puntuación sitúase entre os límites 0-10%.	10	A1 B1 C2 D1 A5 B2 C4 B4 C14 C15
Prácticas de laboratorio	Obrigatorias. Puntúanse pola valoración do seu desenvolvemento (5%) así como pola dos correspondentes informes de prácticas (15%), un por cada práctica realizada. Estes han de confeccionarse de forma individual, conter táboas, gráficas e os cálculos necesarios para a obtención dos resultados, así como unha análise dos mesmos. Deben entregarse no prazo que se estableza, a través da plataforma Moovi.	20	A1 B1 C2 D1 A5 B2 C4 B4 C14 C15
Exame de preguntas obxectivas	No que se refire ás probas escritas, a materia divídese en dous partes (I e II) ás que corresponde un peso relativo do 50%. Consistirán na resolución de cuestións e problemas.	35	A1 B1 C2 D1 A5 B2 C14 B4 C15
	Primeira Proba Curta (Parte I). Voluntaria. Recuperable no Exame. Terá lugar na metade do período de clases aproximadamente. Será liberatoria da materia avaliada, soamente se se alcánza ou supera a puntuación de 5 puntos sobre 10. De ser a puntuación inferior a 5 pero igual ou superior a 3.75, representará o 50% da nota da parte I, correspondendo o resto, á parte I do Exame, si iso conduce a unha cualificación máis alta; de non ser así prevalece a desta última. O seu peso na nota global depende do resultado doutros apartados e sitúase entre os límites: 0-40%.		

Exame de preguntas obxectivas	Segunda Proba Curta/Exame	35	A1 A5	B1 B2 B4	C2 C14 C15	D1
	Segunda Proba Curta (Parte II). Voluntaria. Recuperable no Exame. Non é liberatoria; a cualificación ten utilidade para realizar media coa parte II do Exame, non de forma independente. Terá lugar preto do final do período de clases. Suporá, en principio, un 25% da cualificación da parte II, pero de non conducir a unha media superior, prevalecerá a nota da parte II do Exame. O seu peso na nota global depende do resultado doutros apartados e sitúase entre os límites: 0-10%.					
	Exame. Obrigatorio. Realizarase a final do cuadrimestre, tras o período de clases (Maio o Xuño). Os estudantes que non superen a Primeira Proba Curta (non obteñan unha puntuación ≥ 5) deberán realizar todos os exercicios propostos. Aqueles que a superaron poderán realizar tamén, de forma voluntaria, os exercicios correspondentes á parte I para mellorar a súa cualificación. O seu peso na nota global depende do resultado doutros apartados e sitúase entre os límites: 26.25%-80%.					
	A cualificación combinada das probas escritas (non se inclúen os tests mencionados no primeiro apartado) ha de ser polo menos, 3.75 sobre 10 para que poida superarse a materia. Non pode superarse si non se realizan tanto as Prácticas de Laboratorio como o Exame. Véxanse tamén puntos segundo e terceiro do seguinte apartado					
	A avaliación de segunda oportunidade descríbese no primeiro punto do seguinte apartado.					

Outros comentarios sobre a Avaliación

- Na *evaluación de segunda oportunidade* (finais de Xuño ou principios de Xullo) os estudantes deberán realizar o correspondente Exame, de non ser así mantendrán a calificación da primeira oportunidade. A calificación global na segunda oportunidade non será inferior á da primeira. As Prácticas de Laboratorio teñen un peso do 20%. Poderán tenerse en conta as puntuacións correspondentes ao apartado de Resolución de Problemas, á segunda Proba Curta e tamén a da Primeira Proba Curta (no último caso soamente si ≥ 3.75), nas proporcións establecidas anteriormente, si iso dá lugar a unha calificación combinada máis alta. De non ser así, a puntuación do Exame, calculada con todos os exercicios, prevalece e representa o 80% da cualificación global.
- A calificación combinada das probas escritas ha de ser polo menos 3.75 sobre 10 para que poida facerse media cos outros apartados da avaliación. A puntuación media global ha de ser de 5 puntos sobre 10 ou superior para superar a materia. Tanto as Prácticas como o Exame son obrigatorios.
- A realización de dúas ou máis tests, ou a presentación dun ou mais exercicios en clase de seminario (apartado de Resolución de Exercicios), realización de práctica, ou de calquera das probas curtas, fai imposible que a calificación sexa 'non presentado'.

Bibliografía. Fontes de información

Bibliografía Básica

Atkins, P.W.; de Paula, J.; Keeler, J., **Atkins Physical Chemistry**, 11th, Oxford University Press, 2018

Levine, I. N., **Physical Chemistry**, 6th ed., McGraw Hill, 2009

Bibliografía Complementaria

Levine, I. N., **Quantum Chemistry**, 7th, Pearson, 2014

Hollas, J.M., **Modern Spectroscopy**, 4th, Wiley, 2004

Levine, I.N., **Molecular Spectroscopy**, 1st ed., John Wiley & Sons, 1975

Banwell, C. N., **Fundamentals of Molecular Spectroscopy**, 4th, McGraw-Hill, 1994

Requena, A. ; Zúñiga, J., **Espectroscopía**, 1, Pearson, 2004

Gil Criado, M.; Núñez Barriocanal, J.L., **Espectroscopía Molecular**, 1, Garceta, 2018

Bernath, P.J., **Spectra of Atoms and Molecules**, 4th, Oxford University Press, 2020

Atkins, P. W. ; Friedman, R., **Molecular Quantum Mechanics**, 4th ed., Oxford University Press, 2005

Atkins, P. W., **Quanta : a handbook of concepts**, 2nd ed., Oxford University Press, 1991

Recomendacións

Materias que se recomienda cursar simultaneamente

Química física V: Cinética química/V11G201V01308

Materias que se recomienda ter cursado previamente

Química física I: Termodinámica química/V11G201V01203

Química física II: Superficies e coloides/V11G201V01208

Química física III: Química cuántica/V11G201V01303
