



Guía Docente						
Datos Identificativos				2013/14		
Asignatura (*)	Química Física 2		Código	610G01017		
Titulación						
Descriptores						
Ciclo	Período	Curso	Tipo	Créditos		
Grao	2º cuatrimestre	Segundo	Obrigatoria	6		
Idioma	CastelánGalegoInglés					
Prerrequisitos						
Departamento	Química Física e Enxeñaría Química 1					
Coordinación	Fernandez Perez, Maria Isabel	Correo electrónico	isabel.fernandez.perez@udc.es			
Profesorado	Canle López, Moisés Fernandez Perez, Maria Isabel Santaballa Lopez, Juan Arturo	Correo electrónico	moises.canle@udc.es isabel.fernandez.perez@udc.es arturo.santaballa@udc.es			
Web	campusvirtual.udc.es/moodle/					
Descripción xeral	<p>Esta asignatura é continuación natural da de Química Física I, e na mesma abórdase a aprendizaxe de coñecementos, destrezas e competencias asociados a interacción da radiación electromagnética ou feixes de partículas coa materia, tanto no que se refire á caracterización estructural como os aspectos fundamentais de técnicas de análise.</p> <p>-----</p> <p>This subject follows Physical Chemistry I, and deals with the knowledge, skills and competencies associated with the interaction of electromagnetic radiation, or particle beams, with matter, in terms of the key aspects of its structural characterization, and the basics of the corresponding analytical techniques.</p>					

Competencias da titulación		
Código	Competencias da titulación	

Resultados da aprendizaxe		
Competencias de materia (Resultados de aprendizaxe)	Competencias da titulación	
Entende-las diversas formas nas que a radiación electromagnética interacciona coa materia, e como consecuencia delo os distintos tipos de espectroscopía, e a información estrutural e analítica que cada un deles pode suministrar.	A1 A7 A8 A9 A12 A25	B1 B3 C2 C3 C8
Comprende-los fundamentos teóricos dos procesos de emisión e absorción de radiación electromagnética, con especial fincapé no significado do momento dipolar de transición.	A1 A7 A8 A9 A12 A25	B1 B2 B3 C2 C3 C8
Entende-lo fundamento teórico que explica a intensidade e a forma dos sinais espectrais, así como ser capaz de realizar prediccións sobre as mesmas en casos concretos.	A1 A7 A8 A9 A12 A14 A20 A21 A25	B1 B2 B3 C2 C6 B4 C8



Saber aplica-los fundamentos da teoría de grupos.	A1 A8 A14	B1 B2 B3 B4	C1 C2 C3 C6
Comprende-los fundamentos teóricos dos distintos tipos de espectroscopia, así como a súa aplicación de cara a elucidación estrutural e as técnicas de análise.	A1 A7 A8 A9 A12 A14 A15 A20 A21 A25	B1 B2 B3 B4	C1 C2 C6 C8
Determinación práctica de diversos tipos de espectros, análise e interpretación dos mesmos, tanto dende o punto de vista estrutural como analítico, cualitativo e cuantitativo.	A7 A12 A14 A16 A17 A18 A19 A20 A21 A22 A23 A24 A26	B1 B2 B3 B4 B5 B6 B7	C1 C2 C3 C6 C7 C8
Comprender e aplicar-los fundamentos teóricos e prácticos da Fotoquímica, así como as súas implicacíons básicas en procesos ambientais.	A1 A8 A9 A12 A14 A15 A16 A17 A18 A19 A20 A21 A22 A23 A24 A25 A26	B1 B2 B3 B4 B5 B6 B7	C1 C2 C3 C6 C7 C8



Entende-las bases teóricas e prácticas implicadas nos métodos de difracción, con especial fincapé na elucidación de estruturas cristalinas por difracción de raios X.	A1 A7 A8 A9 A12 A14 A15 A16 A17 A18 A19 A20 A21 A22 A23 A24 A25	B1 B2 B3 B4 B5 B6 B7	C1 C2 C3 C6 C7 C8
Comprende-los fundamentos teóricos e prácticos da acción láser, e as súas aplicacións, con énfase na Química.	A1 A7 A8 A9 A12 A14 A15 A16 A17 A18 A19 A20 A21 A22 A23 A24 A25	B1 B2 B3 B4 B5 B6 B7	C1 C2 C3 C6 C7 C8



Adquirir coñecementos básicos doutras espectroscopías, así como dispoñer dunha visión xeral das novas tendencias no procura da determinación estrutural das especies químicas e das técnicas de análise.	A1 A7 A8 A9 A12 A14 A15 A16 A17 A18 A19 A20 A21 A22 A23 A24 A25	B1 B2 B3 B4 B5 B6 B7	C1 C2 C3 C6 C7 C8
--	---	--	----------------------------------

Contidos	
Temas	Subtemas
Introducción á Espectroscopía	Radiación electromagnética e materia. Procesos resonantes e non resonantes. Tratamento clásico da interacción radiación-materia. Tratamento semiciclásico: coeficientes de Einstein e momento dipolar de transición. Emisión espontánea. Reglas de selección. Tipos de espectros. Poboación dos niveis de enerxía: intensidades. Lei de Bouger-Lambert-Beer. Factores que determinan a forma e anchura das bandas espectrais. Aspectos xerais das técnicas experimentais. Transformada de Fourier.
Simetría en Química	Elementos e operacións de simetría. Propiedades básicas dos grupos. Representacións de grupos. Representacións reducibles e irreducibles. Aplicacións en Química.
Espectros de rotación	Mecánica clásica da rotación molecular. Clasificación das moléculas. Espectros de moléculas diatómicas e lineais. Poboación de niveis e intensidade das transicións. Distorsión centrífuga. Espectros de trompos simétricos. Espectros de trompos asimétricos. Determinación da estrutura molecular. Aspectos experimentais da Espectroscopía de microondas: efecto Stark e momento dipolar.
Espectros de vibración	Moléculas diatómicas. Aproximación do oscilador armónico: niveis de enerxía. Anarmonicidad. Potenciais empíricos. Reglas de selección. Enerxías de disociación. Espectros de rotación-vibración.  Moléculas poliatómicas. Tratamento clásico: modos e coordenadas normais. Tratamiento mecanocuántico: niveis de enerxía. Consideracións de simetría. Reglas de selección. Frecuencias de grupo. Técnicas experimentais.  Espectros Raman. Polarizabilidade molecular e tensor de polarizabilidade. Teoría clásica da dispersión Rayleigh e Raman. Representación cuántica. Espectros de rotación pura. Espectros de vibración. Técnicas experimentais.



Espectros electrónicos	Moléculas diatómicas. Estados electrónicos. Reglas de Selección. Intensidade das compoñentes de vibración: principio de Frank-Condon. Estrutura de vibración: progresións e secuencias. Enerxías de disociación.  Moléculas poliatómicas. Estrutura e estados electrónicos. Reglas de selección. Espectros de moléculas simples. Cromóforos. Dicroismo circular e dispersión óptica rotatoria. Espectroscopía de UV-VIS: técnicas experimentais e aplicacións analíticas.  Espectros fotoelectrónicos. Procesos de ionización. Técnicas experimentais. Espectroscopía fotoelectrónica de ultravioleta (UPS): Interpretación dos espectros. Interpretación dos espectros fotoelectrónicos de rayos X (XPS o ESCA): Desprazamento químico.
Fundamentos de Fotoquímica	Fluorescencia e fosforescencia: diagrama de Jablonski. Leis da fotoquímica. Rendimento cuántico. Desactivación bimolecular (Quenching). Procesos fotoquímicos. Técnicas experimentais e aplicacións.
Espectroscopía del láser	A acción láser. Tipos de láseres. Espectroscopías de absorción e excitación: fluorescencia inducida por láser. Espectroscopías Raman. Espectroscopía de ionización multifotónica: detección TOF. Espectroscopía de femtosegundo: aplicacións na dinámica da reacción química. Técnicas experimentais.
Espectroscopías de Resonancia Magnética	Estados de espín nuclear e electrónico: reglas de selección.  Espectroscopia de resonancia magnética nuclear (RMN). O desprazamento químico: contribucións o factor de apantallamento. Estructura fina: acoplamentos. Aspectos experimentais: emprego da transformadas de Fourier. Procesos de relaxación.  Espectroscopia de resonancia de espín electrónico (ESR): estructura fina e hiperfinia. Técnicas experimentais e aplicacións.
Métodos de difracción	Características xerais do fenómeno de difracción. Difracción de raios X. Condicions de Bragg e Laue. O factor de estrutura. Determinación da estrutura cristalina. Síntesis de Fourier. O problema da fase. Difracción de neutróns. Difracción de electróns por gases. Ecuación de Wierl e función de distribución radial. Técnicas experimentais e aplicacións.
Outras espectroscopías e novas tendencias	Espectroscopía Mössbauer. Introducción as espectroscopías nonlineais. Aplicacións. Novas tendencias.

## Planificación

Metodoloxías / probas	Horas presenciais	Horas non presenciais / traballo autónomo	Horas totais
Sesión maxistral	19	28.5	47.5
Prácticas de laboratorio	10	12.5	22.5
Seminario	8	12	20
Solución de problemas	9	13.5	22.5
Presentación oral	2	5	7
Prácticas a través de TIC	0	4	4
Simulación	2	4	6
Lecturas	0	6.5	6.5
Proba de resposta múltiple	0	3	3



Proba mixta	3	7	10
Atención personalizada	1	0	1

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

Metodoloxías		Descripción
Sesión maxistral		Básicamente é a clásica lección maxistral, en xeral con apoio audiovisual, na que se exporán os aspectos fundamentais con contidos teóricos da asignatura. Pénsase nun formato dinámico no que hai lugar para a participación d@s estudiantes.
Prácticas de laboratorio		Realización de actividades de carácter práctico con obxeto de aplicar os coñecementos teóricos, e, á vez, adquirir-las destrezas experimentais asociadas os mesmos.
Seminario		Esta actividade levarase a cabo en grupo reducido. Profundización nos distintos temas baseada na participación activa d@s estudiantes.
Solución de problemas		Aplicación práctica, tanto numérica como conceptual, dos coñecementos teóricos.
Presentación oral		Exposición verbal dun traballo preparado en grupo sobre un tema proposto polo profesor. Na actividade se inclúe un debate posterior sobre o tema obxecto da presentación.
Prácticas a través de TIC		Está orientada o aprendizaxe efectivo do alumnado a través de actividades de carácter práctico mediante a utilización das tecnoloxías da información e as comunicacóns.
Simulación		Utilización de programas informáticos, no aula de informática, para reproducir diversos tipos de espectros, o que tra-la correspondente análise crítica debe de servir como experiencia de aprendizaxe. Actividad para ser realizada en grupos reducidos.
Lecturas		Conxunto de textos que se empregarán como fonte de profundización nos contidos traballados.
Proba de resposta múltiple		O longo do curso realizaranse, empregando a plataforma de teleformación MOODLE, unha serie de probas para avaliar o aprendizaxe dos conceptos, destrezas, competencias e habilidades asociados á asignatura.
Proba mixta		Combinación de distintos tipos de preguntas: tipo test, de resposta breve, tipo ensaio. Con este último tipo se busca que se responda por escrito a preguntas de certa amplitud, valorando que se proporcione a resposta esperada, o que permite avaliar coñecementos, capacidade de razonamento, e espírito crítico.

Atención personalizada		Descripción
Prácticas de laboratorio		Con elo trátase de orienta-l@ estudiante, en primeiro lugar, na análise crítica dos resultados obtidos no laboratorio e nos exercicios de simulación; por outra banda, na mellora da súa presentación oral, e, finalmente, na busca da mellora estratexia personalizada de aborda-la solución de problemas.
Seminario		
Presentación oral		
Solución de problemas		O momento da súa utilización será fixada directamente polos docentes e @s estudiantes según xurda a necesidade de utilización. En principio levaránse a cabo nos despachos dos docentes.
Simulación		

Avaliación		
Metodoloxías	Descripción	Cualificación
Proba mixta	Examen final con dúas partes, unha de corte teórico (50%) que inclúe preguntas tipo test, de respuesta breve e/ou de ensaio, e outra de solución de problemas (50%) na que se avaliará a habilidade na aplicación dos contidos teóricos para a resolución de problemas numéricos.	40
Prácticas de laboratorio	A avaliação inclue: * Aspectos operacionais. * Confección da libreta de laboratorio. * Análise crítica dos resultados. * Informe final das prácticas de laboratorio.	15



Seminario	Preparación actividades dos seminarios. Asistencia e participación activa nos seminarios.	10
Presentación oral	Calidade da información contida na presentación. Habilidades amosadas na presentación. Capacidade para defende-lo traballo presentado.	10
Prácticas a través de TIC	Realización das actividades propostas on-line (remisión de arquivos, participación nos foros, na WIKI, elaboración mapas conceptuais).	5
Simulación	Análise crítico dos resultados obtidos nas simulacións.	10
Proba de resposta múltiple	Este conxunto de probas, exclusivamente ON-LINE, computará un 10% sempre e cando se realicen nos prazos sinalados.	10

#### Observacións avaliación

Globalmente trátase de avaliar a adquisición dos coñecementos, a capacidade de crítica, de síntese, de comparación, de elaboración, de aplicación e de orixinalidade d@ estudiante.

A asistencia á totalidade das prácticas de laboratorio e obligatoria. Alternativamente pode optarse por un exame práctico relativo as prácticas de laboratorio de 4 horas de duración.

Primeira oportunidade: para que se teñan en conta as outras actividades suxeitas a avaliación é preciso obter unha cualificación mínima de catro (4) sobre dez (10) en cada unha das dúas partes&nbsp;da proba mixta e nas prácticas de laboratorio.

Segunda oportunidade: repetición da proba mixta e das&nbsp;actividades presenciais&nbsp;suxeitas a avaliación&nbsp;nas que non se acadou o aprobado (non se inclúe o relativo os seminarios). Igual que na primeira oportunidade é preciso obter unha cualificación mínima de catro (4) sobre dez (10),&nbsp;nas dúas partes&nbsp;da proba mixta&nbsp;e nas prácticas de laboratorio, para considerar as outras actividades suxeitas a avaliación, e así establecer a cualificación final.

É importante ter presente que en ambas oportunidades para que se teñan en conta as calificaciones nas distintas actividades suxeitas a avaliación é&nbsp;preciso obte-la calificación mínima de 4&nbsp;como se indicou anteriormente.&nbsp;De non alcanzarse dita puntuación mínima nalguna delas, e no caso de que la media ponderada&nbsp;sea superior o igual a 5&nbsp;(sobre 10),&nbsp;a asignatura figurará como suspensa coa cualificación de 4.5.

Debe quedar claramente establecido que a obtención de unha cualificación superior a 4,&nbsp;en cada unha das&nbsp;dúas partes da proba mixta e nas prácticas de laboratorio, non implica o aprobado automático na asignatura. A cualificación final calcúlase de acordo coas porcentaxes anteriormente establecidas.

No caso de&nbsp;que haxa varios estudiantes, coa mesma cualificación,&nbsp;que poidan optar&nbsp;á matrícula de honra, se lles convocará a unha proba&nbsp;escrita sempre e cando o número de matrículas sexa inferior o de estudiantes na devandita situación. Compre sinalar que @s estudiantes avaliados na segunda oportunidade poderán optar á matrícula de honra se o número máximo de éstas non se ten cuberto na súa totalidade na primeira oportunidade.&nbsp;&nbsp;&nbsp;

Para obter a cualificación de non presentado, os alumnos non poderán ter participado en máis dun 50 % das actividades availables programadas.

Finalmente, polo que atinxo a sucesivos cursos académicos, o proceso de ensinanza-aprendizaxe, incluída a avaliación, refírese a un curso académico, e polo tanto volta a comenzar&nbsp;de cero&nbsp;co novo curso.

#### Fontes de información



Bibliografía básica	<ul style="list-style-type: none"><li>- P. W. Atkins (2002). Atkins' physical chemistry. Oxford University Press</li><li>- (). <a href="http://www.ch.ic.ac.uk/local/symmetry/">http://www.ch.ic.ac.uk/local/symmetry/</a>.</li><li>- (). <a href="https://campusvirtual.udc.es/moodle/">https://campusvirtual.udc.es/moodle/</a>.</li><li>- J. Michael Hollas (2004). Modern Spectroscopy. J. Wiley &amp; Sons</li><li>- Carol E. Wayne &amp; Richard P. Wayne (1996). Photochemistry. Oxford Chemistry Primers, 39</li><li>- Ooi, Li-ling. (2010). Principles of x-ray crystallography. Oxford University Press</li><li>- Luis Carballeira Ocaña &amp; Ignacio Pérez Juste (2008). Problemas de Espectroscopía Molecular . Oleiros : Netbiblo</li><li>- P. W. Atkins (2008). Química Física. Médica Panamericana</li><li>- Alberto Requena &amp; José Zúñiga (2007). Química Física : problemas de espectroscopia : fundamentos, átomos y moléculas diatómicas . Madrid : Pearson Educación</li><li>- J. Keeler (2010). Understanding NMR spectroscopy. John Wiley and Sons</li></ul>
Bibliografía complementaria	<ul style="list-style-type: none"><li>- B. Metin (2005 ). Basic <sup>1</sup>H-and <sup>13</sup>C-NMR spectroscopy . Elsevier</li><li>- A. M. Ellis (2005). Electronic and photoelectron spectroscopy fundamentals and case studies. Cambridge University Press</li><li>- Alberto Requena Rodríguez &amp; José Zúñiga Román (2004). Espectroscopia . Pearson Educación, S.A.</li><li>- Víctor Lúaña, V. M. García Fernández, E. Francisco &amp; J. M. Recio (2002). Espectroscopía molecular. Universidad de Oviedo, Servicio de Publicaciones</li><li>- Andrew Gilbert &amp; Jim Baggott (1991). Essentials of molecular photochemistry. Oxford ; Boston : Blackwell Scientific Publications</li><li>- I. N. Levine (2004). Fisicoquímica 5<sup>a</sup> edición. McGraw-Hill</li><li>- P. R. Griffiths (2007). Fourier transform infrared spectrometry. John Wiley &amp; Sons</li><li>- C. Gell (2006). Handbook of single molecule fluorescence spectroscopy. Oxford University Press</li><li>- Wikipedia - inglés (). <a href="http://en.wikipedia.org/wiki/Wikipedia">http://en.wikipedia.org/wiki/Wikipedia</a>.</li><li>- Wikipedia - Español (). <a href="http://es.wikipedia.org/wiki/Wikipedia">http://es.wikipedia.org/wiki/Wikipedia</a>.</li><li>- (). <a href="http://jersey.uoregon.edu/vlab/PlankRadiationFormula/index.html">http://jersey.uoregon.edu/vlab/PlankRadiationFormula/index.html</a>.</li><li>- (). <a href="http://micro.magnet.fsu.edu/optics/timeline/people/jablonski.html">http://micro.magnet.fsu.edu/optics/timeline/people/jablonski.html</a>.</li><li>- (). <a href="http://nobelprize.org/nobel_prizes/">http://nobelprize.org/nobel_prizes/</a>.</li><li>- (). <a href="http://ozonewatch.gsfc.nasa.gov/">http://ozonewatch.gsfc.nasa.gov/</a>.</li><li>- (). <a href="http://photobiology.info/">http://photobiology.info/</a>.</li><li>- Fotoquímica (inglés) (). <a href="http://web.mac.com/titoscaiano/Research_in_Scaianos_labs/teaching_movies.html">http://web.mac.com/titoscaiano/Research_in_Scaianos_labs/teaching_movies.html</a>.</li><li>- (). <a href="http://www.johnkyrk.com/photosynthesis.html">http://www.johnkyrk.com/photosynthesis.html</a>.</li><li>- (). <a href="http://www.nist.gov/">http://www.nist.gov/</a>.</li><li>- (). <a href="http://www.pol-us.net/ASP_Home/index.html">http://www.pol-us.net/ASP_Home/index.html</a>.</li><li>- (). <a href="http://www.spectroscopynow.com/">http://www.spectroscopynow.com/</a>.</li><li>- G. Socrates (2005). Infrared and raman characteristic group frequencies tables and charts. John Wiley &amp; Sons</li><li>- (2005). International tables for crystallography. Dordrecht : Springer</li><li>- (2005). International tables for crystallography brief teaching edition of volume A : space-group symmetry. Dordrecht : Springer</li><li>- R. Jenkins (1996). Introduction to X-ray powder diffractometry. John Wiley &amp; Sons</li><li>- Helmet H. Telle, Angel Gonzalez Ureña, Robert J. Donovan (2007). Laser chemistry : spectroscopy, dynamics and applications. West Sussex : John Wiley &amp; Sons</li><li>- H. H. Telle (2007). Laser chemistry : spectroscopy, dynamics and applications. John Wiley &amp; Sons</li><li>- Françoise Hippert et al. (2006). Neutron and x-ray spectroscopy. Dordrecht : Springer</li><li>- T. N. Mitchell (2004). NMR--from spectra to structures: an experimental approach. Springer</li><li>- J. R. Albani (2007). Principles and applications of fluorescence spectroscopy. Oxford : Blackwell</li><li>- J. R. Lakowicz (2006). Principles of fluorescence spectroscopy. Springer</li><li>- D. C. Harris (1989). Symmetry and spectroscopy an introduction to vibrational and electronic spectroscopy. Dover</li><li>- S. F. A. Kettle (2007). Symmetry and structure : readable group theory for chemists. John Wiley</li></ul>



Recomendacións	
Materias que se recomenda ter cursado previamente	
Química Física 3/610G01018 Experimentación en Química Física/610G01019 Química Física Avanzada/610G01020 Traballo de fin de Grao/610G01043	
Materias que se recomenda cursar simultaneamente	
Laboratorio de Química/610G01032	
Materias que continúan o temario	
Matemáticas 1/610G01001 Matemáticas 2/610G01002 Física 1/610G01003 Física 2/610G01004 Biología/610G01005 Xeología/610G01006 Química 1/610G01007 Química 2/610G01008 Química 3/610G01009 Química 4/610G01010 Química Analítica 1/610G01011 Química Física 1/610G01016 Química Inorgánica 1/610G01021 Química Orgánica 1/610G01026 Química, Información e Sociedade/610G01031	
Observacións	
É moi recomendable que @ estudiante repase con asiduidade os conceptos teóricos introducidos nas clases de teoría, así como que simultáneamente&nbsp;resolva as cuestións e exercicios que se lle irán propoñendo o longo do curso. Desaconséllase estudiar ÚNICAMENTE polos apuntes de clase, que nunca deben sustituir as fontes de consulta&nbsp;recomendadas. Pode resultar moi ÚTIL emprega-las horas de tutoría para aclarar dúbidas e afondar nos coñecementos asociados á asignatura.	

(\*)A Guía docente é o documento onde se visualiza a proposta académica da UDC. Este documento é público e non se pode modificar, salvo casos excepcionais baixo a revisión do órgano competente dacordo coa normativa vixente que establece o proceso de elaboración de guías