



Guía Docente				
Datos Identificativos				2013/14
Asignatura (*)	Química Física 2	Código	610G01017	
Titulación	Grao en Química			
Descritores				
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	Correo electrónico	moises.canle@udc.es	
	Fernandez Perez, Maria Isabel		isabel.fernandez.perez@udc.es	
	Santaballa Lopez, Juan Arturo		arturo.santaballa@udc.es	
Web	campusvirtual.udc.es/moodle/			
Descrición 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 estrutural 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
A1	Utilizar a terminoloxía química, nomenclatura, convenios e unidades.
A7	Coñecer e aplicar as técnicas analíticas.
A8	Coñecer os principios da Mecánica Cuántica e a súa aplicación á estrutura de átomos e moléculas.
A9	Coñecer os rasgos estruturais dos compostos químicos, incluíndo a estereoquímica, así como as principais técnicas de investigación estrutural.
A12	Relacionar as propiedades macroscópicas coas de átomos e moléculas.
A14	Demostrar o coñecemento e comprensión de conceptos, principios e teorías relacionadas coa Química.
A15	Recoñecer e analizar novos problemas e planear estratexias para solucionarlos.
A16	Adquirir, avaliar e utilizar os datos e información bibliográfica e técnica relacionada coa Química.
A17	Traballar no laboratorio Químico con seguridade (manexo de materiais e eliminación de residuos).
A18	Valorar os riscos no uso de sustancias químicas e procedementos de laboratorio.
A19	Levar a cabo procedementos estándares e manexar a instrumentación científica.
A20	Interpretar os datos procedentes de observacións e medidas no laboratorio.
A21	Comprender os aspectos cualitativos e cuantitativos dos problemas químicos.
A22	Planificar, deseñar e desenvolver proxectos e experimentos.
A23	Desenvolver unha actitude crítica de perfeccionamento na labor experimental.
A24	Explicar, de xeito comprensible, fenómenos e procesos relacionados coa Química.
A25	Relacionar a Química con outras disciplinas e recoñecer e valorar os procesos químicos na vida diaria.
A26	Levar a cabo procedementos estándares de laboratorios implicados en traballos analíticos e sintéticos, en relación con sistemas orgánicos e inorgánicos.
B1	Aprender a aprender.
B2	Resolver problemas de forma efectiva.
B3	Aplicar un pensamento crítico, lóxico e creativo.
B4	Traballar de forma autónoma con iniciativa.
B5	Traballar de forma colaborativa.



B6	Comportarse con ética e responsabilidade social como cidadán e como profesional.
B7	Comunicarse de maneira efectiva nun entorno de traballo.
C1	Expresarse correctamente, tanto de forma oral coma escrita, nas linguas oficiais da comunidade autónoma.
C2	Dominar a expresión e a comprensión de forma oral e escrita dun idioma estranxeiro.
C3	Utilizar as ferramentas básicas das tecnoloxías da información e as comunicacións (TIC) necesarias para o exercicio da súa profesión e para a aprendizaxe ao longo da súa vida.
C6	Valorar criticamente o coñecemento, a tecnoloxía e a información dispoñible para resolver os problemas cos que deben enfrontarse.
C7	Asumir como profesional e cidadán a importancia da aprendizaxe ao longo da vida.
C8	Valorar a importancia que ten a investigación, a innovación e o desenvolvemento tecnolóxico no avance socioeconómico e cultural da sociedade.

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	C1 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	C1 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 B4	C1 C2 C6 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	B1	C1
	A12	B2	C2
	A14	B3	C3
	A16	B4	C6
	A17	B5	C7
	A18	B6	C8
	A19	B7	
	A20		
	A21		
	A22		
	A23		
	A24		
	A26		
	Comprender e aplicar-los fundamentos teóricos e prácticos da Fotoquímica, así como as súas implicacións básicas en procesos ambientais.	A1	B1
A8		B2	C2
A9		B3	C3
A12		B4	C6
A14		B5	C7
A15		B6	C8
A16		B7	
A17			
A18			
A19			
A20			
A21			
A22			
A23			
A24			
A25			
A26			
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	B1	C1
	A7	B2	C2
	A8	B3	C3
	A9	B4	C6
	A12	B5	C7
	A14	B6	C8
	A15	B7	
	A16		
	A17		
	A18		
	A19		
	A20		
	A21		
	A22		
	A23		
	A24		
A25			



Comprende-los fundamentos teóricos e prácticos da acción láser, e as súas aplicacións, con énfase na Química.	A1	B1	C1
	A7	B2	C2
	A8	B3	C3
	A9	B4	C6
	A12	B5	C7
	A14	B6	C8
	A15	B7	
	A16		
	A17		
	A18		
	A19		
	A20		
	A21		
	A22		
	A23		
A24			
A25			
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	B1	C1
	A7	B2	C2
	A8	B3	C3
	A9	B4	C6
	A12	B5	C7
	A14	B6	C8
	A15	B7	
	A16		
	A17		
	A18		
	A19		
	A20		
	A21		
	A22		
	A23		
A24			
A25			

Contidos	
Temas	Subtemas
Introducción á Espectroscopía	Radiación electromagnética e materia. Procesos resonantes e non resonantes. Tratamento clásico da interacción radiación-materia. Tratamento semiclásico: 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. Dicroísmo 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 raios X (XPS o ESCA): Desprazamento químico.
Fundamentos de Fotoquímica	Fluorescencia e fosforescencia: diagrama de Jablonski. Leis da fotoquímica. Rendemento 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: regras de selección. Espectroscopía de resonancia magnética nuclear (RMN). O desprazamento químico: contribucións o factor de apantallamento. Estrutura fina: acoplamentos. Aspectos experimentais: emprego da transformadas de Fourier. Procesos de relaxación. Espectroscopía de resonancia de espín electrónico (ESR): estrutura fina e hiperfina. Técnicas experimentais e aplicacións.



Métodos de difracción	Características xerais do fenómeno de difracción. Difracción de raios X. Condicións 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	
Metodoloxías	Descrición
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 estudantes.
Prácticas de laboratorio	Realización de actividades de carácter práctico con obxeto de aplica-los coñecementos teóricos, e, á vez, adquiri-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 estudantes.
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 comunicacións.
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 responde por escrito a preguntas de certa amplitude, valorando que se proporcione a resposta esperada, o que permite avaliar coñecementos, capacidade de razoamento, e espírito crítico.



Atención personalizada

Metodoloxías	Descrición
Prácticas de laboratorio Seminario Presentación oral Solución de problemas Simulación	Con elo trátase de orienta-l@ estudante, 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. O momento da súa utilización será fixada directamente polos docentes e @s estudantes según xurda a necesidade de utilización. En principio levaráanse a cabo nos despachos dos docentes.

Avaliación

Metodoloxías	Descrición	Cualificación
Proba mixta	Examen final con dúas partes, unha de corte teórico (50%) que inclúe preguntas tipo test, de resposta 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 avaliación inclúe: * 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



Bibliografía complementaria	<ul style="list-style-type: none">- B. Metin (2005). Basic ¹H-and ¹³C-NMR spectroscopy . Elsevier- A. M. Ellis (2005). Electronic and photoelectron spectroscopy fundamentals and case studies. Cambridge University Press- Alberto Requena Rodríguez & José Zúñiga Román (2004). Espectroscopia . Pearson Educación, S.A.- Víctor Luaña, V. M. García Fernández, E. Francisco & J. M. Recio (2002). Espectroscopía molecular. Universidad de Oviedo, Servicio de Publicaciones- Andrew Gilbert & Jim Baggott (1991). Essentials of molecular photochemistry. Oxford ; Boston : Blackwell Scientific Publications- I. N. Levine (2004). Físicoquímica 5ª edición. McGraw-Hill- P. R. Griffiths (2007). Fourier transform infrared spectrometry. John Wiley & Sons- C. Gell (2006). Handbook of single molecule fluorescence spectroscopy. Oxford University Press- Wikipedia - inglés (). http://en.wikipedia.org/wiki/Wikipedia.- Wikipedia - Español (). http://es.wikipedia.org/wiki/Wikipedia.- (). http://jersey.uoregon.edu/vlab/PlankRadiationFormula/index.html.- (). http://micro.magnet.fsu.edu/optics/timeline/people/jablonski.html.- (). http://nobelprize.org/nobel_prizes/.- (). http://ozonewatch.gsfc.nasa.gov/.- (). http://photobiology.info/.- Fotoquímica (inglés) (). http://web.mac.com/titoscaiano/Research_in_Scaianos_labs/teaching_movies.html.- (). http://www.johnkyrk.com/photosynthesis.html.- (). http://www.nist.gov/.- (). http://www.pol-us.net/ASP_Home/index.html.- (). http://www.spectroscopynow.com/.- G. Socrates (2005). Infrared and raman characteristic group frequencies tables and charts. John Wiley & Sons- (2005). International tables for crystallography. Dordrecht : Springer- (2005). International tables for crystallography brief teaching edition of volume A : space-group symmetry. Dordrecht : Springer- R. Jenkins (1996). Introduction to X-ray powder diffractometry. John Wiley & Sons- Helmet H. Telle, Angel Gonzalez Ureña, Robert J. Donovan (2007). Laser chemistry : spectroscopy, dynamics and applications. West Sussex : John Wiley & Sons- H. H. Telle (2007). Laser chemistry : spectroscopy, dynamics and applications. John Wiley & Sons- Françoise Hippert et al. (2006). Neutron and x-ray spectroscopy. Dordrecht : Springer- T. N. Mitchell (2004). NMR--from spectra to structures: an experimental approach. Springer- J. R. Albani (2007). Principles and applications of fluorescence spectroscopy. Oxford : Blackwell- J. R. Lakowicz (2006). Principles of fluorescence spectroscopy. Springer- D. C. Harris (1989). Symmetry and spectroscopy an introduction to vibrational and electronic spectroscopy. Dover- S. F. A. Kettle (2007). Symmetry and structure : readable group theory for chemists. John Wiley
------------------------------------	---

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

Bioloxía/610G01005

Xeoloxía/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 @ estudante repase con asiduidade os conceptos teóricos introducidos nas clases de teoría, así como que simultaneamente resolva as cuestións e exercicios que se lle irán propoñendo o longo do curso.

Desaconséllase estudar ÚNICAMENTE polos apuntes de clase, que nunca deben substituír as fontes de consulta recomendadas.

Pode resultar moi ÚTIL empregar-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