



Guía Docente				
Datos Identificativos			2014/15	
Asignatura (*)	Química Física 2	Código	610G01017	
Titulación				
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	moodle.udc.es/			
Descrición xeral	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.			

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	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	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	B1 B2 B3	C1 C2 C6 C8
Saber aplica-los fundamentos da teoría de grupos.	A1 A8 A14	B1 B2 B3	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	B1 B2 B3	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 A19 A20 A21 A23 A24 A26	B1 B2 B3 B5 B6 B7	C1 C2 C3 C6 C7 C8
Comprender e aplicar-los fundamentos teóricos e prácticos da Fotoquímica, así como as súas implicacións básicas en procesos ambientais.	A1 A8 A9 A12 A14 A15 A16 A19 A20 A21 A23 A24 A26	B1 B2 B3 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 A19 A20 A21 A23 A24	B1 B2 B3 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 A19 A20 A21 A23 A24	B1 B2 B3 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 A19 A20 A21 A23 A24	B1 B2 B3 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 semiclásico: coeficientes de Einstein e momento dipolar de transición. Emisión espontánea. Regras 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	<p>Moléculas diatómicas.</p> <p>Aproximación do oscilador armónico: niveis de enerxía. Anharmonicidade. Potenciais empíricos. Regras de selección. Enerxías de disociación. Espectros de rotación-vibración.</p> <p>Moléculas poliatómicas.</p> <p>Tratamento clásico: modos e coordenadas normais. Tratamento mecanocuántico: niveis de enerxía. Consideracións de simetría. Regras de selección. Frecuencias de grupo. Técnicas experimentais.</p> <p>Espectros Raman.</p> <p>Polarizabilidade molecular e tensor de polarizabilidade. Teoría clásica da dispersión Rayleigh e Raman. Representación cuántica. Espectros de rotación pura. Espectros de vibración. Técnicas experimentais.</p>
Espectros electrónicos	<p>Moléculas diatómicas.</p> <p>Estados electrónicos. Regras de selección. Intensidade das compoñentes de vibración: principio de Frank-Condon. Estrutura de vibración: progresións e secuencias. Enerxías de disociación.</p> <p>Moléculas poliatómicas.</p> <p>Estrutura e estados electrónicos. Regras de selección. Espectros de moléculas simples. Cromóforos. Dicroísmo circular e dispersión óptica rotatoria. Espectroscopía de UV-VIS: técnicas experimentais e aplicacións analíticas.</p> <p>Espectros fotoelectrónicos.</p> <p>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.</p>
Fundamentos de Fotoquímica	<p>Fluorescencia e fosforescencia: diagrama de Perrin-Jablonski.</p> <p>Leis da fotoquímica. Rendemento cuántico. Desactivación bimolecular (Quenching).</p> <p>Procesos fotoquímicos. Técnicas experimentais e aplicacións.</p>
Espectroscopía del láser	<p>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.</p>
Espectroscopías de Resonancia Magnética	<p>Estados de espín nuclear e electrónico: regras de selección.</p> <p>Espectroscopia de resonancia magnética nuclear (RMN). O desprazamento químico: contribucións o factor de apantallamento. Estrutura fina: acoplamentos. Aspectos experimentais: emprego da transformada de Fourier. Procesos de relaxación.</p> <p>Espectroscopia de resonancia de espín electrónico (ESR): estrutura fina e hiperfina. Técnicas experimentais e aplicacións.</p>
Métodos de difracción	<p>Características xerais do fenómeno de difracción. Difracción de raios X. Condicións de Bragg e Laue. O factor de estrutura. Determinación da estrutura cristalina. Síntese 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.</p>
Outras espectroscopías e novas tendencias	<p>Espectroscopía Mössbauer. Introducción as espectroscopías nonlineais. Aplicacións. Novas tendencias.</p>



## 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 obxecto 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 as prácticas de laboratorio, proposto pol@ profesor/a. 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. Actividade 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 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	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 persoalizada de aborda-la solución de problemas.
Seminario	
Presentación oral	
Solución de problemas	O momento da súa utilización será fixada directamente pol@s docentes e @s estudantes según xurda a necesidade de utilización. En principio levaráanse a cabo nos despachos d@s docentes.
Simulación	

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.  Competencias que se avalían mediante esta metodoloxía: A1, A7, A8, A9, A12, A14, A15, A16, A20, A21, A24, B1, B2, B3, B6, C1, C2	40
Prácticas de laboratorio	A avaliación inclúe: <ul style="list-style-type: none"> <li>* Aspectos operacionais.</li> <li>* Confección da libreta de laboratorio.</li> <li>* Análise crítica dos resultados.</li> <li>* Informe final das prácticas de laboratorio.</li> </ul> Competencias que se avalían mediante esta metodoloxía: A1, A7, A9, A12, A14, A15, A16, A19, A20, A21, A23, A24, A26, B1, B2, B3, B5, B7, C6	15
Seminario	Preparación actividades dos seminarios. Asistencia e participación activa nos seminarios.  Competencias que se avalían mediante esta metodoloxía: A1, A8, A9, A12, A14, A15, A16, A20, A21, A24, B1, B2, B3, B5, B7, C1, C2, C6, C7, C8	10
Presentación oral	Calidade da información contida na presentación. Habilidades amosadas na presentación. Capacidade para defende-lo traballo presentado.  Competencias que se avalían mediante esta metodoloxía: A1, A7, A8, A9, A12, A14, A15, A16, A20, A21, A24, B2, B3, B5, B6, B7, C1, C2, C3, C6, C7, C8	10
Prácticas a través de TIC	Utilización de TIC nas actividades propostas on-line, a realizar nos prazos sinalados.  Competencias que se avalían mediante esta metodoloxía: A1, A16, B5, B7, C3, C6	5
Simulación	Análise crítico dos resultados obtidos nas simulacións, a realizar nos prazos sinalados.  Competencias que se avalían mediante esta metodoloxía: A1, A7, A8, A9, A12, A14, A15, A16, A20, A21, A24, B1, B2, B3, C3, C6	10
Proba de resposta múltiple	Conxunto de probas ON-LINE, a realizar nos prazos sinalados.  Competencias que se avalían mediante esta metodoloxía: A1, A8, A9, A12, A14, A15, A16, A20, A21, A24, B1, B2, B3, B5, B7, C1, C2, C3, C6, C7, C8	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@ estudante.

A asistencia á totalidade das prácticas de laboratorio e obrigatoria. 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 calificacións nas distintas actividades suxeitas a avaliación é&nbsp;preciso obte-la cualificación 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;sexa superior o igual a 5&nbsp;(sobre 10),&nbsp;a asignatura figurará como suspensa coa cualificación de 4.5 sobre 10.

Debe quedar claramente establecido que a obtención de unha cualificación superior a 4 sobre 10,&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 estudantes, 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 estudantes na devandita situación. Comprensinalar que @s estudantes 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 avaliadas programadas.

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

Caso de empregarse esta asignatura como complemento de formación para estudos de doutoramento, a cualificación será "apto" ou "non apto".

## Fontes de información

### Bibliografía básica

- P. W. Atkins (2002). Atkins' physical chemistry. Oxford University Press
- (). <http://www.ch.ic.ac.uk/local/symmetry/>.
- (). <https://campusvirtual.udc.es/moodle/>.
- J. Michael Hollas (2004). Modern Spectroscopy. J. Wiley & Sons
- Carol E. Wayne & Richard P. Wayne (1996). Photochemistry. Oxford Chemistry Primers, 39
- Ooi, Li-ling. (2010). Principles of x-ray crystallography. Oxford University Press
- Luis Carballeira Ocaña & Ignacio Pérez Juste (2008). Problemas de Espectroscopía Molecular . Oleiros : Netbiblo
- P. W. Atkins (2008). Química Física. Médica Panamericana
- Alberto Requena & José Zúñiga (2007). Química Física : problemas de espectroscopía : fundamentos, átomos y moléculas diatómicas . Madrid : Pearson Educación
- J. Keeler (2010). Understanding NMR spectroscopy. John Wiley and Sons



<b>Bibliografía complementaria</b>	<ul style="list-style-type: none"><li>- B. Metin (2005). Basic <math>^1\text{H}</math>- and <math>^{13}\text{C}</math>-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 Luaña, 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). Físicoquímica 5ª 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

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&nbsp;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&nbsp;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