



Guía Docente				
Datos Identificativos				2015/16
Asignatura (*)	Química Física 2	Código	610G01017	
Titulación				
Descritores				
Ciclo	Período	Curso	Tipo	Créditos
Grao	2º cuatrimestre	Segundo	Obrigatoria	6
Idioma	CastelánGalegoInglés			
Modalidade docente	Presencial			
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 do título	
Código	Competencias do título

Resultados da aprendizaxe			
Resultados de aprendizaxe	Competencias do título		
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 A27	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 A27	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 A27	B1 B2 B3	C1 C2 C6 C8



Saber aplica-los fundamentos da teoría de grupos.	A1 A8 A14 A27	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 A27	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 A27	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 A27	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	B1	C1
	A7	B2	C2
	A8	B3	C3
	A9	B5	C6
	A12	B6	C7
	A14	B7	C8
	A15		
	A16		
	A19		
	A20		
	A21		
	A23		
	A24		
	A27		
Comprende-las 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	B5	C6
	A12	B6	C7
	A14	B7	C8
	A15		
	A16		
	A19		
	A20		
	A21		
	A23		
	A24		
	A27		
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	B5	C6
	A12	B6	C7
	A14	B7	C8
	A15		
	A16		
	A19		
	A20		
	A21		
	A23		
	A24		
	A27		

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	Moléculas diatómicas. Aproximación do oscilador armónico: niveis de enerxía. Anharmonicidade. Potenciais empíricos. Regras de selección. Enerxías de disociación. Espectros de rotación-vibración. Moléculas poliatómicas. Tratamento clásico: modos e coordenadas normais. Tratamento mecanocuántico: niveis de enerxía. Consideracións de simetría. Regras 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. Regras 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. Regras 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 Perrin-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	<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. Estructura 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	Competencias	Horas presenciais	Horas non presenciais / traballo autónomo	Horas totais
Sesión maxistral	A1 A7 A8 A9 A12 A14 A27 B1	19	28.5	47.5
Prácticas de laboratorio	A1 A7 A9 A12 A14 A15 A16 A19 A20 A21 A23 A24 A26 A27 B1 B2 B3 B5 B7 C6	10	12.5	22.5
Seminario	A1 A8 A9 A12 A14 A15 A16 A20 A21 A24 A27 B1 B2 B3 B5 B7 C1 C2 C6 C7 C8	8	12	20
Solución de problemas	A1 A14 A15 A21 A27 B2 C6	9	13.5	22.5
Presentación oral	A1 A7 A8 A9 A12 A14 A15 A16 A20 A21 A24 A27 B2 B3 B5 B6 B7 C1 C2 C3 C6 C7 C8	2	5	7
Prácticas a través de TIC	A1 A16 A27 B5 B7 C3 C6	0	4	4
Simulación	A24 A21 A20 A16 A15 A14 A12 A9 A8 A7 A1 A27 B1 B2 B3 C3 C6	2	4	6
Lecturas	A1 A16 A23 A24 C6 C7 C8	0	6.5	6.5
Proba de resposta múltiple	A24 A21 A20 A16 A15 A14 A12 A9 A8 A1 A27 B1 B2 B3 B5 B7 C1 C2 C3 C7 C8	0	3	3



Proba mixta	A1 A8 A9 A12 A14 A15 A16 A20 A21 A24 B1 B2 B3 B5 B7 C1 C2 C3 C6 C7 C8	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 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 persoalizada de aborda-la 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.

Avaliación			
Metodoloxías	Competencias	Descrición	Cualificación
Proba mixta	A1 A8 A9 A12 A14 A15 A16 A20 A21 A24 B1 B2 B3 B5 B7 C1 C2 C3 C6 C7 C8	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	A1 A7 A9 A12 A14 A15 A16 A19 A20 A21 A23 A24 A26 A27 B1 B2 B3 B5 B7 C6	A avaliación inclue: * Aspectos operacionais (desenvolvemento no laboratorio e confección da correspondente libreta) (5%) * Informe final das prácticas de laboratorio (o que inclúe a análise crítica dos resultados) (10%)	15
Seminario	A1 A8 A9 A12 A14 A15 A16 A20 A21 A24 A27 B1 B2 B3 B5 B7 C1 C2 C6 C7 C8	Preparación actividades dos seminarios. Asistencia e participación activa nos seminarios.	10
Presentación oral	A1 A7 A8 A9 A12 A14 A15 A16 A20 A21 A24 A27 B2 B3 B5 B6 B7 C1 C2 C3 C6 C7 C8	Calidade da información contida na presentación. Habilidades amosadas na presentación. Capacidade para defende-lo traballo presentado.	10
Prácticas a través de TIC	A1 A16 A27 B5 B7 C3 C6	Utilización de TIC nas actividades propostas on-line, a realizar nos prazos sinalados.	5
Simulación	A24 A21 A20 A16 A15 A14 A12 A9 A8 A7 A1 A27 B1 B2 B3 C3 C6	Análise crítico dos resultados obtidos nas simulacións, a realizar nos prazos sinalados.	10
Proba de resposta múltiple	A24 A21 A20 A16 A15 A14 A12 A9 A8 A1 A27 B1 B2 B3 B5 B7 C1 C2 C3 C7 C8	Conxunto de probas ON-LINE, a realizar 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@ 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 con cinco (4.5) sobre dez (10) en cada unha das dúas partes da proba mixta e nas prácticas de laboratorio.

Segunda oportunidade: repetición da proba mixta e das actividades presenciais suxeitas a avaliación 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 con cinco (4.5) sobre dez (10), nas dúas partes da proba mixta 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 cualificacións do resto de actividades suxeitas a avaliación é preciso obter a cualificación mínima de 4 en cada tipo. De non alcanzarse dita puntuación mínima nalguna delas, e no caso de que a media ponderada sexa superior o igual a 5 (sobre 10), a asignatura figurará como suspensa coa cualificación de 4.5 sobre 10.

No caso de cualificacións inferiores a 4 nas actividades avaliadas distintas da proba mixta, ou 4.5 nas prácticas de laboratorio, oportunamente establecerase a data e o procedemento para reenviar/entregar as devanditas actividades.

Debe quedar claramente establecido que a obtención de unha cualificación superior a 4.5 sobre 10, en cada unha das 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 que haxa varios estudantes, coa mesma cualificación, que poidan optar á matrícula de honra, se lles convocará a unha proba escrita sempre e cando o número de matrículas sexa inferior o de estudantes na devandita situación. Compre sinalar 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.

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 comezar de cero 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

- Atkins, Peter W. (2014). Atkins' Physical Chemistry. Oxford : Oxford University Press
- Luis Carballeira Ocaña & Ignacio Pérez Juste (2008). Problemas de Espectroscopía Molecular . Oleiros : Netbiblo
- Atkins, Peter W. (2008). Química física. Buenos Aires : Médica Panamericana
- (). <https://moodle.udc.es/>.

Además das fontes indicadas neste apartado, e no seguinte, poderán suxerirse na plataforma de teleformación MOODLE, outras que ó longo do curso se consideren interesantes.



Bibliografía complementaria	<ul style="list-style-type: none">- (). http://www.spectroscopynow.com/.- (). http://jersey.uoregon.edu/vlab/PlankRadiationFormula/index.html.- (). http://photobiology.info/.- (). http://www.pol-us.net/ASP_Home/index.html.- P. R. Griffiths (2007). Fourier transform infrared spectrometry. John Wiley & Sons- (). http://nobelprize.org/nobel_prizes/.- (). http://www.johnkyrk.com/photosynthesis.html.- (). http://micro.magnet.fsu.edu/optics/timeline/people/jablonski.html.- (). http://ozonewatch.gsfc.nasa.gov/.- (). http://www.nist.gov/.- S. F. A. Kettle (2007). Symmetry and structure : readable group theory for chemists. John Wiley- D. C. Harris (1989). Symmetry and spectroscopy an introduction to vibrational and electronic spectroscopy. Dover- Andrew Gilbert & Jim Baggott (1991). Essentials of molecular photochemistry. Oxford ; Boston : Blackwell Scientific Publications- G. Socrates (2005). Infrared and raman characteristic group frequencies tables and charts. John Wiley & Sons- A. M. Ellis (2005). Electronic and photoelectron spectroscopy fundamentals and case studies. Cambridge University Press- Fotoquímica (inglés) (). http://web.mac.com/titoscaiano/Research_in_Scaianos_labs/teaching_movies.html.- J. R. Albani (2007). Principles and applications of fluorescence spectroscopy. Oxford : Blackwell- C. Gell (2006). Handbook of single molecule fluorescence spectroscopy. Oxford University Press- 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- T. N. Mitchell (2004). NMR--from spectra to structures: an experimental approach. Springer- B. Metin (2005). Basic ¹H-and ¹³C-NMR spectroscopy . Elsevier- Françoise Hippert et al. (2006). Neutron and x-ray spectroscopy. Dordrecht : Springer- R. Jenkins (1996). Introduction to X-ray powder diffractometry. 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- Wikipedia - Español (). http://es.wikipedia.org/wiki/Wikipedia.- Wikipedia - inglés (). http://en.wikipedia.org/wiki/Wikipedia.- I. N. Levine (2004). Físicoquímica 5ª edición. McGraw-Hill- 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- J. R. Lakowicz (2006). Principles of fluorescence spectroscopy. Springer- J. Michael Hollas (2004). Modern Spectroscopy. J. Wiley & Sons- Alberto Requena & José Zúñiga (2007). Química Física : problemas de espectroscopia : fundamentos, átomos y moléculas diatómicas. Madrid : Pearson Educación- J. Keeler (2010). Understanding NMR spectroscopy.- Carol E. Wayne & Richard P. Wayne (1996). Photochemistry. Oxford Chemistry Primers, 39- (). http://www.ch.ic.ac.uk/local/symmetry/.- Ooi, Li-ling (2010). Principles of x-ray crystallography. Oxford University Press- (). https://moodle.udc.es/.
------------------------------------	---

Recomendacións

Materias que se recomenda ter cursado previamente



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

Materias que se recomenda cursar simultaneamente

Laboratorio de Química/610G01032

Materias que continúan o temario

Química Física 3/610G01018

Experimentación en Química Física/610G01019

Química Física Avanzada/610G01020

Traballo de fin de Grao/610G01043

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 as horas de titoría 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