



DATOS IDENTIFICATIVOS

Estados de Agregación

Materia	Estados de Agregación			
Código	V11M030V01205			
Titulación	Máster Universitario en Química Teórica e Modelización Computacional. R.D. 1393/2007			
Descritores	Creditos ECTS	Sinale	Curso	Cuadrimestre
	5	OP	1	An
Lingua de impartición				
Departamento	Química física			
Coordinador/a	Estevez Valcarcel, Carlos Manuel			
Profesorado	Estevez Valcarcel, Carlos Manuel Hermida Ramon, Jose Manuel			
Correo-e	cestevez@uvigo.es			
Web				
Descrición xeral	Nesta materia farase un análise pormenorizado dos distintos estados de agregación da materia. Estableceranse as características principais de cada un destes estados e relacionaranse entre eles destacando os seus elementos comúns e as súas cualidades distintivas. Estudiaranse os fundamentos teóricos para a caracterización de cada estado de agregación e describiranse os modelos máis comúns para a súa descrición. Así mesmo expóranse as técnicas experimentais e computacionais máis empregadas para o estudo dos estados de agregación			

Competencias de titulación

Código	
A1	Adquirir formación en los métodos de la Química Teórica
A2	Adquirir formación en los métodos de modelización
A3	Aplicar los métodos teóricos y de modelización a sistemas químicos en general
A7	Aplicar los métodos teóricos y de modelización a la Nanociencia
A8	Aplicar los métodos teóricos y de modelización al diseño de materiales
B2	Adquirir habilidades generales en el campo de la informática
B3	Ser capaz de utilizar el sistema operativo Unix/Linux
B4	Ser capaz de utilizar grandes programas de cálculo de diferentes tipos
B6	Ser capaz de utilizar estaciones de cálculo y superordenadores
B7	Ser capaz de obtener y manejar bibliografía científico técnica

Competencias de materia

Resultados previstos na materia	Tipoloxía	Resultados de Formación e Aprendizaxe
Recoñecemento das características propias de cada estado de agregación	saber	A2
Coñecemento dos modelos comúns de representación de cada estado de agregación	saber	A2 B1
Aplicación dos modelos comúns de representación de cada estado de agregación	saber facer	A3 B2 B3 B4 B6 B1

Coñecemento das propiedades que se utilizan para caracterizar cada estado de agregación	saber	A1 A2 B1
Coñecemento das forzas responsables dos estados de agregación e das súas diferencias.	saber	A1 A2 B1
Coñecemento das diferentes técnicas empregadas para estudar as fases condensadas e a fase sólida	saber	A1 A2 B1
Aplicación das diferentes técnicas empregadas para estudar as fases condensadas e a fase sólida	saber facer	A2 A3 A1 A2 B2 B3 B4 B6 B1

Contidos

Tema	
1. Forzas Intermoleculares	Forzas Electrostáticas. Forzas de Canxe-Repulsión. Forzas de Inducción. Forzas de Dispersión. Outras Forzas.
2. Complexos e Agregados Intermoleculares.	Descrición Características
3. Potenciais Intermoleculares	Tipos Obtención
4. Estado Gas. Gases Reales	Fugacidade. Ecuacións de Estado Relación entre as ecuacións de estado e as forzas intermoleculares
5. Estado sólido	Características. Reglas de clasificación de redes cristalinas. Sólidos metálicos. Sólidos iónicos. Técnicas de difracción. Raios X e neutróns. Superficies.
6. Estado líquido	Características. Estructura de líquidos. Función de distribución radial. Estudio experimental do estado líquido. Técnicas de difracción. Estudio teórico do estado líquido. Dinámica Molecular e Monte Carlo. Ecuacións de estado de un fluído. Modelos físicos.

Planificación

	Horas na aula	Horas fóra da aula	Horas totais
Sesión maxistral	20	60	80
Traballos tutelados	10	0	10
Prácticas en aulas de informática	20	15	35

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

Metodoloxía docente

	Descrición
Sesión maxistral	Exposición por partes dos profesores dos aspectos máis relevantes de cada tema
Traballos tutelados	Análise crítico dunha publicación científica relacionada con algún dos temas tratados.
Prácticas en aulas de informática	Emprego de distintos métodos teóricos para a modelización dos distintos estados de agregación, con axuda de distintos programas de cálculo.

Atención personalizada

Metodoloxías	Descrición
Sesión maxistral	Consulta co profesor das dúbidas en horario de titorías ou mediante cita
Prácticas en aulas de informática	Consulta co profesor das dúbidas en horario de titorías ou mediante cita

Avaliación

Descrición	Cualificación
Traballos tutelados Informe crítico sobre a publicación ou publicacións científicas a analizar. Nel tense que incluir: * un resumen da mesma, * unha análise dos distintos métodos teóricos e/ou aplicacións computacionais empregadas. * Validez dos resultados obtidos. * Posibilidades de mellorar ou ampliar o estudo. * Bibliografía mais relevante.	100

Outros comentarios sobre a Avaliación

Informe crítico sobre a publicación ou publicacións científicas a analizar. Nel tense que incluir:

- un resumen da mesma,
- unha análise dos distintos métodos teóricos e/ou aplicacións computacionais empregadas.
- Validez dos resultados obtidos.
- Posibilidades de mellorar ou ampliar o estudo.
- Bibliografía mais relevante.

Bibliografía. Fontes de información

Atkins, P. de Paula, J, **Physical Chemistry**, 8,

Ladd. M, **Introduction to Physical Chemistry**, 3,

MacQuarrie D. A., Simon J. D, **Physical Chemistry. A Molecular Approach**,

Stone, A. J, **The theory of Intermolecular Forces**,

Recomendacións**Materias que se recomenda cursar simultaneamente**

Fundamentos Matemáticos da Química Teórica/V11M030V01206

Métodos da Química Cuántica e da Mecánica Estatística/V11M030V01209