



DATOS IDENTIFICATIVOS

Estrutura Electrónica

Materia	Estrutura Electrónica			
Código	V11M030V01203			
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	Mosquera Castro, Ricardo Antonio			
Profesorado	Graña Rodriguez, Ana Maria Mandado Alonso, Marcos Mosquera Castro, Ricardo Antonio Perez Juste, Ignacio			
Correo-e	mosquera@uvigo.es			
Web				
Descrición xeral	(*)Asignatura en la que se imparten conocimientos sobre los métodos de análisis de la densidad electrónica. Especialmente, NBO y QTAIM. También se introducen índices para el estudio de la deslocalización electrónica.			

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
B2	Adquirir habilidades generales en el campo de la informática
B5	Conocer y ser capaz de utilizar programas de gráficos
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
(*)Conocer y aplicar los métodos computacionales para el estudio de la estructura electrónica molecular	saber	A1
	saber facer	A2
		A3
		B2
		B5
		B6
(*)Manejar diversas matrices densidad, índices de deslocalización y conceptos relacionados con los métodos NBO y QTAIM		B1
	saber	A1
	saber facer	A2
		A3
		B2
		B6
		B1

Contidos

Tema

(*)Matrices densidad	(*)
(*)Métodos de análisis de densidad electrónica basados en OMs	(*)
(*)Potencial electrostático molecular	(*)
(*)Método QTAIM	(*)
(*)Otros métodos de análisis de la densidad electrónica	(*)
(*)Deslocalización electrónica	(*)

Planificación

	Horas na aula	Horas fóra da aula	Horas totais
Sesión maxistral	10	30	40
Prácticas en aulas de informática	20	10	30
Traballos tutelados	1	40	41
Resolución de problemas e/ou exercicios	3	9	12
Probas de resposta curta	2	0	2

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

Metodoloxía docente

	Descrición
Sesión maxistral	Atención a la explicación del tema, toma de notas, formular (en caso necesario) preguntas sobre la materia
Prácticas en aulas de informática	Se realiza la práctica que describe el guion proporcionado por el profesor siguiendo sus indicaciones. Durante la realización se hacen las anotaciones que se consideren oportunas. Al terminar la práctica se tabula ordenadamente, analiza y discute los resultados, elaborando un informe.
Traballos tutelados	A cada alumno se le plantea un caso práctico. En él deberá realizar un análisis de densidad electrónica para un sistema molecular. A lo largo de su desarrollo podrá consultar con el profesor las dudas que le surjan. Asimismo, podrá utilizar el aula de informática.
Resolución de problemas e/ou exercicios	Se plantearán ejercicios que el alumno preparará y resolverá posteriormente. En otra sesión de aula se resolverán los problemas por el profesor, discutiendo con los alumnos las dificultades que hayan encontrado.

Atención personalizada

Metodoloxías	Descrición
Prácticas en aulas de informática	Tanto en el aula de informática como en los trabajos tutelados, los profesores encargados de cada práctica o trabajo, atenderán individualizadamente las dudas que formulen los alumnos.
Traballos tutelados	Tanto en el aula de informática como en los trabajos tutelados, los profesores encargados de cada práctica o trabajo, atenderán individualizadamente las dudas que formulen los alumnos.

Avaliación

	Descrición	Cualificación
Prácticas en aulas de informática	Se valorará la calidad de los resultados obtenidos. La discusión de los resultados. El empleo de un lenguaje científico preciso y la tabulación y/o graficación correcta de los resultados. Utilización correcta de unidades y cifras significativas.	30
Traballos tutelados	Se valorará la calidad de los resultados obtenidos, y el rigor en su discusión. La autonomía del alumno en su trabajo. El empleo de un lenguaje científico preciso y la tabulación y/o graficación correcta de los resultados. Utilización correcta de unidades y cifras significativas.	40
Probas de resposta curta	El alumno deberá responder de manera individual y sin material de apoyo, una serie de preguntas cortas, relacionadas con los aspectos más teóricos de la asignatura.	30

Outros comentarios sobre a Avaliación

Bibliografía. Fontes de información

F. Jensen, **Introduction to Computational Chemistry**, 2,
P. Popelier, **Atoms in Molecules**, 1,
A. Szabo, N.S. Ostlund, **Modern Quantum Chemistry**, 1,

Recomendacións

Materias que continúan o temario

Materias que se recomenda ter cursado previamente

Fundamentos Matemáticos da Química Teórica/V11M030V01206

Métodos da Química Cuántica e da Mecánica Estatística/V11M030V01209
