



## DATOS IDENTIFICATIVOS

### Tese de Máster

Materia	Tese de Máster			
Código	V11M030V01201			
Titulación	Máster Universitario en Química Teórica e Modelización Computacional. R.D. 1393/2007			
Descritores	Creditos ECTS	Sinale	Curso	Cuadrimestre
	30	OB	2	2c
Lingua de impartición	Inglés			
Departamento	Química orgánica			
Coordinador/a	Nieto Faza, Olalla			
Profesorado	Nieto Faza, Olalla Silva López, Carlos			
Correo-e	faza@uvigo.es			
Web				
Descrición xeral	Introduction to research through a simple research project			

## Competencias de titulación

Código	
A2	Adquirir formación en los métodos de modelización
A3	Aplicar los métodos teóricos y de modelización a sistemas químicos en general
A4	Aplicar los métodos teóricos y de modelización a sistemas bioquímicos
A5	Aplicar los métodos teóricos al estudio de la reactividad y la catálisis
A6	Aplicar los métodos teóricos y de modelización a la Química Atmosférica y a la Astroquímica
A7	Aplicar los métodos teóricos y de modelización a la Nanociencia
A8	Aplicar los métodos teóricos y de modelización al diseño de materiales
B1	Mejorar la comunicación oral y escrita en Inglés u otros idiomas europeos
B7	Ser capaz de obtener y manejar bibliografía científico técnica

## Competencias de materia

Resultados previstos na materia	Tipoloxía	Resultados de Formación e Aprendizaxe
To learn how to tackle chemical problems by designing a suitable computational strategy	saber facer	A2 A3 A4 A5 A6 A1 A2
To compile all the pertinent bibliographic references and to select the most relevant information.	saber facer	B1
To learn how to dimension the required computations according to the existing hardware and software resources.	saber facer	A3 A4 A5 A6 A1 A2

To carry out the necessary computations, discuss critically the results and re-design the saber facer computational strategy if needed.	A3 A4 A5 A6 A1 A2
To write a detailed report on the methods and results and defend it in public in front of a tribunal.	B1

### Contidos

#### Tema

(*)Setup and framing of the problem	(*)(*)
(*)Design of a a research plan	(*)(*)
(*)Theoretical analysis and Computation	(*)
(*)Data analysis and report writing.	(*)

### Planificación

	Horas na aula	Horas fóra da aula	Horas totais
Proxectos	28	700	728
Traballos e proxectos	2	20	22

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

### Metodoloxía docente

	Descrición
Proxectos	A simple research project. Thre results are presented in a detailed written report and in a public talk in front of a tribunal.

### Atención personalizada

#### Metodoloxías Descrición

Proxectos	 The student gets help in every step of the process (assessment of the literature, design of the computational method, practical aspects of the computations, and the writing of the report and its presentation as a short talk).
-----------	---

### Avaliación

	Descrición	Cualificación
Proxectos	Assessment of the design and execution of the research project by the tutor(s)	85
Traballos e proxectos	Assessment of the report and talk given by the student following the tribunal's recommendation.	15

### Outros comentarios sobre a Avaliación

Assessment of the report and talk given by the student following the tribunal's recommendation.

### Bibliografía. Fontes de información

R.A. Day and B. Gastel, **How to write a scientific paper**, 6th,  
W.C. Booth, G.G. Colomb, J.M. Williams, **The Craft of Research**, 3rd,  
**scopus.com**,  
A.M. Coghill, L. R. Garson, **The ACS Style Guide: Effective Communication of Scientific Information**, 3rd,

### Recomendacións