



## Facultad de Química

### (\*)Centro

(\*)

A Universidade de Vigo ven impartindo dende a súa creación no ano 1990 estudos de química, tanto de licenciatura como de doutoramento. Na Facultade de Química, creada en outubro de 2003 por segregación da antiga Facultade de Ciencias, impártense actualmente todas as titulacións, relacionadas coa química na Universidade de Vigo. Así, por unha banda, estanse a impartir os últimos cursos da licenciatura en química, xa en proceso de extinción. Pola outra, estase en proceso de implantación do novo grao en química e xa están funcionando, completamente implantados, os novos mestrados e doutoramentos. Tanto grao como mestrados e doutoramentos están plenamente adaptados ao espazo europeo de educación superior (EEES).

Servizos do centro:

O Decanato da Facultade de Química está situado no primeiro andar do bloque E e a Delegación de Alumnos de Química está situada na planta baixa do mesmo bloque.

Ademais, o edificio de Ciencias Experimentais conta con seguintes servizos centralizados para os alumnos das tres facultades que alberga:

- Secretaría de alumnos e conserxería (pavillón de servizos centrais)
- Cafetería e comedor
- Reprografía (pavillón E)
- Aulas de informática (Pavillóns C e E)
- Biblioteca (Edificio anexo)

### (\*)calendario académico

(\*) 

## Máster Universitario en Química Teórica y Modelización Computacional. R.D. 1393/2007

### Asignaturas

#### Curso 1

Código	Nombre	Cuatrimestre	Cr.totales
V11M030V01104	Curso de Nivelación (Física)	1c	5
V11M030V01105	Curso de Nivelación (Química)	1c	5

V11M030V01107	Curso de Nivelación (Matemáticas)	1c	5
V11M030V01202	Curso de Idiomas (Lengua europea)	An	5
V11M030V01203	Estructura Electrónica	An	5
V11M030V01204	Dinámica de la Reacción Química	An	5
V11M030V01205	Estados de Agregación	An	5
V11M030V01206	Fundamentos Matemáticos de Química Teórica	2c	5
V11M030V01207	Técnicas Computacionales y Cálculo Numérico	2c	6
V11M030V01208	Dinámica	2c	5
V11M030V01209	Métodos de la Química Cuántica y de la Mecánica Estadística	2c	10
V11M030V01210	Sólidos	2c	5
V11M030V01211	Estados Excitados	2c	5
V11M030V01213	Simetría en Átomos, Moléculas e Sólidos e Mecánica Cuántica	2c	9
V11M030V01214	Métodos Avanzados de la Química Cuántica	2c	5

**DATOS IDENTIFICATIVOS****Curso de Nivelación (Física)**

Asignatura	Curso de Nivelación (Física)			
Código	V11M030V01104			
Titulación	Máster Universitario en Química Teórica y Modelización Computacional. R.D. 1393/2007			
Descriptores	Creditos ECTS	Seleccione	Curso	Cuatrimestre
	5	OP	1	1c
Lengua Impartición	Castellano			
Departamento	Química física			
Coordinador/a	Perez Juste, Ignacio			
Profesorado	Flores Rodriguez, Jesus Ramon Mosquera Castro, Ricardo Antonio Perez Juste, Ignacio			
Correo-e	uviqipij@uvigo.es			
Web	<a href="http://http://webs.uvigo.es/pop_qtymc">http://http://webs.uvigo.es/pop_qtymc</a>			
Descripción general	La materia pretende proporcionar una formación química y física básica a aquellos alumnos provenientes de titulaciones en que la misma pueda no ser suficiente para poder cursar con éxito los módulos obligatorios del Master.			

**Competencias de titulación**

Código	
A1	(*)Adquirir formación en los métodos de la Química Teórica
A2	(*)Adquirir formación en los métodos de modelización

**Competencias de materia**

Resultados previstos en la materia	Tipología	Resultados de Formación y Aprendizaje
Enunciar los postulados de la Mecánica Cuántica	saber	A1
Enunciar los postulados de la Mecánica Estadística	saber	A1 A2
Saber escribir configuraciones electrónicas en sistemas atómicos y aplicar el principio de Pauli y la regla de Hund	saber	A1
Saber escribir estructuras de Lewis para sistemas moleculares sencillos	saber	A1
Saber aplicar el método de orbitales moleculares a moléculas sencillas	saber	A1
Diferenciar la estructura y propiedades de los distintos estados de agregación.	saber	A1
Relacionar la absorción o emisión de radiación en las distintas zonas del espectro con el movimiento implicado y describir las aplicaciones de las correspondientes técnicas espectrocópicas	saber	A1
Definir velocidad de reacción, ecuación cinética y relacionarla con el mecanismo de la reacción.	saber	A1

**Contenidos**

Tema	
Postulados de la Mecánica Cuántica y sus consecuencias químicas	(*)(*)
Aspectos básicos de los métodos aproximados en Mecánica Cuántica	(*)(*)

Postulados de la Mecánica Estadística y su aplicación a sistemas de partículas independientes.	(*)(*)
Estructura Atómica: resultados experimentales y modelos atómicos	(*)(*)
Estructura Atómica: distribución electrónica, términos electrónicos.	(*)(*)
Estructura Atómica: El método HF-SCF.	(*)(*)
Estructura Molecular: principios básicos	(*)(*)
Estructura Molecular: el método OM y su aplicación cualitativa a moléculas simples.	(*)(*)
Movimientos moleculares: análisis de la vibración y rotación.	(*)(*)
Interacción radiación materia: métodos espectroscópicos.	(*)(*)
Fuerzas Intermoleculares y Estados de Agregación	(*)(*)
Principios de Cinética y Dinámica Química	(*)(*)

### Planificación

	Horas en clase	Horas fuera de clase	Horas totales
Sesión magistral	15	30	45
Resolución de problemas y/o ejercicios de forma autónoma	25	50	75
Pruebas de respuesta corta	1	0	1
Resolución de problemas y/o ejercicios	4	0	4

\*Los datos que aparecen en la tabla de planificación son de carácter orientativo, considerando la heterogeneidad de alumnado

### Metodologías

	Descripción
Sesión magistral	Descripción básica de los temas.
Resolución de problemas y/o ejercicios de forma autónoma	Se proponen cuestiones elementales y complejas así como algunos ejercicios numéricos.

### Atención personalizada

Metodologías	Descripción
Resolución de problemas y/o ejercicios de forma autónoma	- En las clases dedicadas a la resolución de problemas. - En las tutorías voluntarias.

### Evaluación

	Descripción	Calificación
Sesión magistral	Pruebas de respuesta breve	50
Resolución de problemas y/o ejercicios de forma autónoma	Resolución de problemas. Entrevista oral. Debate.	50

### Otros comentarios sobre la Evaluación

- Mediante el uso de las tutorías voluntarias se encauzará el aprendizaje.
- Mediante pruebas de autoevaluación el alumno podrá comprobar si su nivel es óptimo para superar las pruebas de respuesta breve, los problemas y la entrevista.

### Fuentes de información

I.N. Levine , Fisicoquímica , McGraw-Hill, 2004 (5ªed.)

□ I.N. Levine ,□Physical Chemistry□, McGraw-Hill, 2002 (5ª ed.)

□ P.W. Atkins, □Química Física□, Omega, Barcelona, 1999;

□ □Atkins' Physical Chemistry□, (con J. de Paula) Oxford Univ. Press., 2006, (8ª ed).

---

## **Recomendaciones**

**DATOS IDENTIFICATIVOS****Curso de Nivelación (Química)**

Asignatura	Curso de Nivelación (Química)			
Código	V11M030V01105			
Titulación	Máster Universitario en Química Teórica e Modelización Computacional. R.D. 1393/2007			
Descriptores	Creditos ECTS	Seleccione	Curso	Cuatrimestre
	5	OP	1	1c
Lengua Impartición				
Departamento	Química física			
Coordinador/a	Hermida Ramon, Jose Manuel			
Profesorado	Estevez Valcarcel, Carlos Manuel Hermida Ramon, Jose Manuel			
Correo-e	jose_hermida@uvigo.es			
Web				
Descripción general				

**Competencias de titulación**

Código

**Competencias de materia**

Resultados previstos en la materia	Tipología	Resultados de Formación y Aprendizaje
------------------------------------	-----------	---------------------------------------

**Contidos**

Tema

**Planificación**

Horas en clase      Horas fuera de clase      Horas totales

\*Los datos que aparecen en la tabla de planificación son de carácter orientativo, considerando la heterogeneidad de alumnado

**Metodoloxía docente**

Descripción

**Atención personalizada****Avaliación**

Descripción

Calificación

**Otros comentarios sobre la Evaluación****Bibliografía. Fontes de información****Recomendacións**

**DATOS IDENTIFICATIVOS****Curso de Nivelación (Matemáticas)**

Asignatura	Curso de Nivelación (Matemáticas)			
Código	V11M030V01107			
Titulación	Máster Universitario en Química Teórica e Modelización Computacional. R.D. 1393/2007			
Descriptores	Creditos ECTS	Seleccione	Curso	Cuatrimestre
	5	OP	1	1c
Lengua Impartición				
Departamento	Química física			
Coordinador/a	Graña Rodríguez, Ana Maria			
Profesorado	Graña Rodríguez, Ana Maria Mandado Alonso, Marcos			
Correo-e	ana@uvigo.es			
Web				
Descripción general				

**Competencias de titulación**

Código	
--------	--

**Competencias de materia**

Resultados previstos en la materia	Tipología	Resultados de Formación y Aprendizaje

**Contidos**

Tema	
Funcións de unha variable	Funcións Diferenciación Integración
Funcións de varias variables	Derivadas parciais Multiplicadores de Lagrange Integración múltiple
Ecuacións diferenciais	Ecuacións diferenciais de primeiro orde Ecuacións diferenciais de segundo orde
Operadores	Operadores lineais Conmutación Operadores hermíticos
Álgebra de matrices	Matrices inversas, ortogonais, unitarias Problemas de autovalores

**Planificación**

	Horas en clase	Horas fuera de clase	Horas totales
Sesión maxistral	16	24	40
Resolución de problemas e/ou exercicios	22	33	55
Resolución de problemas e/ou exercicios	8	20	28

\*Los datos que aparecen en la tabla de planificación son de carácter orientativo, considerando la heterogeneidad de alumnado

**Metodoloxía docente**

	Descripción
Sesión maxistral	Exposición de temas e resolución de exercicios exemplo por parte do profesor
Resolución de problemas e/ou exercicios	Resolución na aula de problemas e exercicios de xeito individual ou en grupo

---

**Atención personalizada**

---

**Pruebas****Descripción**

Resolución de problemas e/ou exercicios Segueamento por parte do profesor de cada un dos alumnos e asistencia destes ás titorías individuais.

---

---

**Avaliación**

---

## Descripción

## Calificación

Resolución de problemas e/ou exercicios Resolución de problemas ou exercicios propostos polo profesor que serán resoltos 100  
exercicios e entregados individualmente polos esdudantes

---

---

**Otros comentarios sobre la Evaluación**

---

---

**Bibliografía. Fontes de información**

---

R.E. Larsson, **Calculo Vol I**,

R.E. Larsson, **Calculo Vol II**,

D.A. McQuarrie, **Mathematics for physical chemistry**,

---

---

**Recomendacións**

---

**Asignaturas que continúan el temario**

---

Fundamentos Matemáticos da Química Teórica/V11M030V01206

---



**DATOS IDENTIFICATIVOS****Curso de Idiomas (Lengua europea)**

Asignatura	Curso de Idiomas (Lengua europea)			
Código	V11M030V01202			
Titulación	Máster Universitario en Química Teórica y Modelización Computacional. R.D. 1393/2007			
Descriptores	Creditos ECTS 5	Seleccione OB	Curso 1	Cuatrimestre An
Lengua	Castellano			
Impartición	Inglés			
Departamento	Química física			
Coordinador/a	Flores Rodriguez, Jesus Ramon			
Profesorado	Flores Rodriguez, Jesus Ramon			
Correo-e	flores@uvigo.es			
Web	http://faitic.uvigo.es			
Descripción general				

**Competencias de titulación**

Código	
A1	(*)Adquirir formación en los métodos de la Química Teórica
B1	(*)Mejorar la comunicación oral y escrita en Inglés u otros idiomas europeos
B2	(*)Adquirir habilidades generales en el campo de la informática
B7	(*)Ser capaz de obtener y manejar bibliografía científico técnica

**Competencias de materia**

Resultados previstos en la materia	Tipología	Resultados de Formación y Aprendizaje
Saber expresarse de forma aceptable en idioma Inglés	saber	B1
Conocer los aspectos científicos y técnicos del idioma Inglés de más importancia en el contexto de la titulación.	saber hacer	B1
Saber cómo redactar un artículo en Inglés.	saber hacer	B1 B2 B1
Saber entender e interpretar el Inglés oral.	saber hacer	A1 B1 B2 B1

**Contenidos**

Tema	
El Inglés científico y técnico: generalidades	(*)
Jerga científico-técnica de interés en la Química Teórica. Acrónimos	(*)
Principios generales en la redacción de textos científicos y técnicos en Inglés	(*)
Habilidades de comprensión del Inglés hablado.	(*)

**Planificación**

	Horas en clase	Horas fuera de clase	Horas totales
Sesión magistral	2	18	20
Eventos docentes y/o divulgativos	4	6	10
Seminarios	5	11	16
Presentaciones/exposiciones	5	19	24
Resolución de problemas y/o ejercicios	7	25	32
Debates	4	16	20
Actividades introductorias	3	0	3

\*Los datos que aparecen en la tabla de planificación son de carácter orientativo, considerando la heterogeneidad de alumnado

### Metodologías

	Descripción
Sesión magistral	(*)Exposición en un aula
Eventos docentes y/o divulgativos	(*)Asistencia a conferencias
Seminarios	(*)Análisis de dudas/trabajos.
Presentaciones/exposiciones	(*)Presentación de trabajos
Resolución de problemas y/o ejercicios	(*)Análisis de comprensión oral y escrita
Debates	(*)Discusión sobre un tema
Actividades introductorias	(*)Descripción de la asignatura y comprobación del nivel de partida de los alumnos.

### Atención personalizada

Metodologías	Descripción
Resolución de problemas y/o ejercicios	

### Evaluación

	Descripción	Calificación
Resolución de problemas y/o ejercicios	(*)Comprensión oral y escrita	100

### Otros comentarios sobre la Evaluación

### Fuentes de información

Day, Robert A., **How to write and publish a scientific paper**, Gastel, Barbara,  
Kaplan, S.M., **The English-Spanish Spanish-English dictionary of Chemistry**, 1ª,  
Maizell, R.E., **How to Find Chemical Information**, 3ª,

### Recomendaciones

**DATOS IDENTIFICATIVOS****Estructura Electrónica**

Asignatura	Estructura Electrónica			
Código	V11M030V01203			
Titulación	Máster Universitario en Química Teórica e Modelización Computacional. R.D. 1393/2007			
Descriptores	Creditos ECTS	Seleccione	Curso	Cuatrimestre
	5	OP	1	An
Lengua Impartición				
Departamento	Química física			
Coordinador/a	Mosquera Castro, Ricardo Antonio			
Profesorado	Graña Rodríguez, Ana María Mandado Alonso, Marcos Mosquera Castro, Ricardo Antonio Perez Juste, Ignacio			
Correo-e	mosquera@uvigo.es			
Web				
Descripción general	(*)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 en la materia	Tipología	Resultados de Formación y Aprendizaje
(*)Conocer y aplicar los métodos computacionales para el estudio de la estructura electrónica molecular	saber	A1
	saber hacer	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 hacer	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	(*)

<b>Planificación</b>			
	Horas en clase	Horas fuera de clase	Horas totales
Sesión maxistral	10	30	40
Prácticas en aulas de informática	20	10	30
Trabajos tutelados	1	40	41
Resolución de problemas e/ou ejercicios	3	9	12
Probas de resposta curta	2	0	2

\*Los datos que aparecen en la tabla de planificación son de carácter orientativo, considerando la heterogeneidad de alumnado

<b>Metodoloxía docente</b>	
	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.
Trabajos 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 ejercicios	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.

<b>Atención personalizada</b>	
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.
Trabajos 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.

<b>Avaliación</b>		
	Descrición	Calificación
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
Trabajos 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

### **Otros comentarios sobre la Evaluación**

**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**

**Asignaturas que continúan el temario**

Métodos Avanzados da Química Cuántica/V11M030V01214

**Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente**

Fundamentos Matemáticos da Química Teórica/V11M030V01206  
Métodos da Química Cuántica e da Mecánica Estatística/V11M030V01209

**DATOS IDENTIFICATIVOS****Dinámica da Reacción Química**

Asignatura	Dinámica da Reacción Química			
Código	V11M030V01204			
Titulación	Máster Universitario en Química Teórica e Modelización Computacional. R.D. 1393/2007			
Descriptores	Creditos ECTS	Seleccione	Curso	Cuatrimestre
	5	OP	1	An
Lengua Impartición	Castelán			
Departamento	Química física Química orgánica			
Coordinador/a	Flores Rodriguez, Jesus Ramon			
Profesorado	Estevez Valcarcel, Carlos Manuel Flores Rodriguez, Jesus Ramon Nieto Faza, Olalla Silva López, Carlos			
Correo-e	flores@uvigo.es			
Web	<a href="http://faitic.uvigo.es">http://faitic.uvigo.es</a>			
Descripción general	La materia pretende sentar las bases de la Dinámica de la Reacción Química. Ahora se introduce la teoría de colisiones y se presentan las teorías del estado de transición y la teoría RRKM de las reacciones unimoleculares. Se describen también aspectos como los métodos experimentales en Cinética y Dinámica de la Reacción Química. Se aplican todos estos fundamentos a reacciones orgánicas e inorgánicas de interés astrofísico y atmosférico, así como a otras de interés biológico, poniéndose especial énfasis en el análisis de los procesos elementales fotoquímicos.			

**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
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
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
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 en la materia	Tipología	Resultados de Formación y Aprendizaje
Conocer los aspectos básicos de la caracterización de las Superficies de Energía Potencial y su aplicación al estudio de la reactividad química	saber	A1 A2
Conocer aspectos avanzados de las Superficies de Energía Potencial y su aplicación a sistemas complejos	saber	A1 A2 A3
Saber describir los estados excitados y conocer los procesos elementales en Fotoquímica Molecular, incluyendo las transiciones no adiabáticas	saber	A1 A2 A3
Saber incluir el efecto del medio en las reacciones químicas	saber	A1 A2 A3

Conocer los métodos experimentales en Dinámica de la Reacción Química	saber	A1 A2 A3
Conocer las teorías fundamentales de la Dinámica Química	saber	A1 A2 A3
Saber plantear el estudio teórico de la dinámica de diversos sistemas	saber hacer	A3 A4 A5 A6 A1 A2
Saber aplicar programas de cálculo a casos concretos	saber hacer	A4 A5 A6 A1 A2 B1 B2 B3 B4 B5 B6 B1

### Contidos

#### Tema

- Aspectos básicos de la Dinámica de la Reacción Química.

- Superficies de energía potencial: aspectos básicos.

- Superficies de energía potencial: aspectos avanzados

- Dinámica de la Reacción Química: Teorías Dinámicas y Estadísticas

- Procesos elementales en Fotoquímica

- Reacciones en fases condensadas

- Aplicaciones a reacciones de interés astrofísico y atmosférico

- Aplicaciones a reacciones de interés químico-orgánico y bioquímico.

### Planificación

	Horas en clase	Horas fuera de clase	Horas totales
Sesión maxistral	6	0	6
Trabajos tutelados	12	65	77
Seminarios	8	30	38
Probas de tipo test	4	0	4

\*Los datos que aparecen en la tabla de planificación son de carácter orientativo, considerando la heterogeneidad de alumnado

### Metodología docente

	Descripción
Sesión maxistral	Lección expositiva en un aula
Trabajos tutelados	Se proponen trabajos tutelados de tipo teórico-práctico para desarrollar un aspecto expuesto en una sesión magistral. Puede implicar el uso de software adecuado. Los grupos de investigación que sustentan el Máster proporcionan los medios y el espacio físico para el desarrollo de los trabajos.
Seminarios	Discusión en aula o dependencias de investigación de las cuestiones, problemas y ejercicios computacionales planteados

### Atención personalizada

Metodologías	Descripción
Seminarios	Se ayudará al estudiante en el uso de programas y en la comprensión de aspectos en los que tenga dificultades.

Trabajos tutelados Se ayudará al estudiante en el uso de programas y en la comprensión de aspectos en los que tenga dificultades.

---

---

### **Avaliación**

	Descripción	Calificación
Trabajos tutelados	Se puntúan los informes presentados	50
Seminarios	Se valorarán las respuestas proporcionadas en los seminarios	20
Pruebas de tipo test	Nota obtenida en la resolución de sencillos cuestionarios	30

---

---

### **Otros comentarios sobre la Evaluación**

---

---

### **Bibliografía. Fontes de información**

---

"Basic Chemical Kinetics", H. Eyring, S.H. Lin, S.M. Lin, John Wiley, 1980

"Energy Landscapes" D.J. Wales, Cambridge, 2003

"Unimolecular Reaction Dynamics", T. Baer and W.L. Hase, Oxford University Press, 1996

---

### **Recomendacións**

#### **Asignaturas que continúan el temario**

Dinámica Química e Molecular e Simulación e Modelización por Ordenador/V11M030V01102

---

#### **Asignaturas que se recomienda cursar simultáneamente**

Dinámica/V11M030V01208

Estados de Agregación/V11M030V01205

Estrutura Electrónica/V11M030V01203

---

**DATOS IDENTIFICATIVOS****Estados de Agregación**

Asignatura	Estados de Agregación			
Código	V11M030V01205			
Titulación	Máster Universitario en Química Teórica e Modelización Computacional. R.D. 1393/2007			
Descriptores	Creditos ECTS	Seleccione	Curso	Cuatrimestre
	5	OP	1	An
Lengua 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				
Descripción general	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 exporanse 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 en la materia	Tipología	Resultados de Formación y Aprendizaje
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 saber facer fase sólida	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 en clase	Horas fuera de clase	Horas totales
Sesión maxistral	20	60	80
Traballos tutelados	10	0	10
Prácticas en aulas de informática	20	15	35

\*Los datos que aparecen en la tabla de planificación son de carácter orientativo, considerando la heterogeneidad de alumnado

### Metodoloxía docente

	Descrición
Sesión maxistral	Exposición por partes dos profesores dos aspectos mais 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 titorias ou mediante cita
Prácticas en aulas de informática	Consulta co profesor das dúbidas en horario de titorias ou mediante cita
Traballos tutelados	Consulta co profesor das dúbidas en horario de titorias ou mediante cita

### Avaliación

Descrición	Calificación
------------	--------------

- \* un resúmen 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 máis relevante.

---

### **Otros comentarios sobre la Evaluación**

---

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

- un resúmen 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 máis 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**

---

#### **Asignaturas que se recomenda cursar simultaneamente**

---

Fundamentos Matemáticos da Química Teórica/V11M030V01206

Métodos da Química Cuántica e da Mecánica Estatística/V11M030V01209

---

**DATOS IDENTIFICATIVOS****Fundamentos Matemáticos de Química Teórica**

Asignatura	Fundamentos Matemáticos de Química Teórica			
Código	V11M030V01206			
Titulación	Máster Universitario en Química Teórica y Modelización Computacional. R.D. 1393/2007			
Descriptores	Creditos ECTS	Seleccione	Curso	Cuatrimestre
	5	OB	1	2c
Lengua Impartición	Química física			
Departamento	Química física			
Coordinador/a	Flores Rodriguez, Jesus Ramon			
Profesorado	Flores Rodriguez, Jesus Ramon			
Correo-e	flores@uvigo.es			

----- GUÍA DOCENTE NO PUBLICADA -----

**DATOS IDENTIFICATIVOS****Técnicas Computacionais e Cálculo Numérico**

Asignatura	Técnicas Computacionais e Cálculo Numérico			
Código	V11M030V01207			
Titulación	Máster Universitario en Química Teórica e Modelización Computacional. R.D. 1393/2007			
Descriptores	Creditos ECTS	Seleccione	Curso	Cuatrimestre
	6	OB	1	2c
Lengua Impartición				
Departamento	Química física			
Coordinador/a	Hermida Ramon, Jose Manuel			
Profesorado	Hermida Ramon, Jose Manuel			
Correo-e	jose_hermida@uvigo.es			
Web				
Descripción general				

**Competencias de titulación**

Código

**Competencias de materia**

Resultados previstos en la materia	Tipología	Resultados de Formación y Aprendizaje

**Contidos**

Tema

**Planificación**

Horas en clase      Horas fuera de clase      Horas totales

\*Los datos que aparecen en la tabla de planificación son de carácter orientativo, considerando la heterogeneidad de alumnado

**Metodoloxía docente**

Descripción

**Atención personalizada****Avaliación**

Descripción      Calificación

**Otros comentarios sobre la Evaluación****Bibliografía. Fontes de información****Recomendacións**

**DATOS IDENTIFICATIVOS****Dinámica**

Asignatura Dinámica

Código V11M030V01208

Titulación Máster  
Universitario en  
Química Teórica y  
Modelización  
Computacional.  
R.D. 1393/2007

Descriptores	Creditos ECTS	Seleccione	Curso	Cuatrimestre
	5	OP	1	2c

Lengua

Impartición

Departamento Química física

Coordinador/a Flores Rodriguez, Jesus Ramon

Profesorado Flores Rodriguez, Jesus Ramon

Correo-e flores@uvigo.es

----- GUÍA DOCENTE NO PUBLICADA -----

**DATOS IDENTIFICATIVOS****Métodos de la Química Cuántica y de la Mecánica Estadística**

Asignatura	Métodos de la Química Cuántica y de la Mecánica Estadística			
Código	V11M030V01209			
Titulación	Máster Universitario en Química Teórica y Modelización Computacional. R.D. 1393/2007			
Descriptores	Creditos ECTS	Seleccione	Curso	Cuatrimestre
	10	OB	1	2c
Lengua Impartición				
Departamento	Química física			
Coordinador/a	Flores Rodriguez, Jesus Ramon			
Profesorado	Flores Rodriguez, Jesus Ramon			
Correo-e	flores@uvigo.es			

----- GUÍA DOCENTE NO PUBLICADA -----

**DATOS IDENTIFICATIVOS****Sólidos**

Asignatura Sólidos

Código V11M030V01210

Titulación Máster  
Universitario en  
Química Teórica y  
Modelización  
Computacional.  
R.D. 1393/2007

Descriptores	Creditos ECTS	Seleccione	Curso	Cuatrimestre
	5	OP	1	2c

Lengua

Impartición

Departamento Química física

Coordinador/a Flores Rodriguez, Jesus Ramon

Profesorado Flores Rodriguez, Jesus Ramon

Correo-e flores@uvigo.es

----- GUÍA DOCENTE NO PUBLICADA -----

**DATOS IDENTIFICATIVOS****Estados Excitados**

Asignatura Estados Excitados

Código V11M030V01211

Titulación Máster  
Universitario en  
Química Teórica y  
Modelización  
Computacional.  
R.D. 1393/2007

Descriptores	Creditos ECTS	Seleccione	Curso	Cuatrimestre
	5	OP	1	2c

Lengua

Impartición

Departamento Química física

Coordinador/a Flores Rodriguez, Jesus Ramon

Profesorado Flores Rodriguez, Jesus Ramon

Correo-e flores@uvigo.es

----- GUÍA DOCENTE NO PUBLICADA -----



**DATOS IDENTIFICATIVOS****Simetría en Átomos, Moléculas e Sólidos e Mecánica Cuántica**

Asignatura	Simetría en Átomos, Moléculas e Sólidos e Mecánica Cuántica			
Código	V11M030V01213			
Titulación	Máster Universitario en Química Teórica y Modelización Computacional. R.D. 1393/2007			
Descriptores	Creditos ECTS	Seleccione	Curso	Cuatrimestre
	9	OB	1	2c
Lengua	Castellano			
Impartición				
Departamento	Química física			
Coordinador/a	Graña Rodriguez, Ana Maria			
Profesorado	Graña Rodriguez, Ana Maria			
Correo-e	ana@uvigo.es			
Web				
Descripción general				

**Competencias de titulación**

Código	
A3	(*)Aplicar los métodos teóricos y de modelización a sistemas químicos en general

**Competencias de materia**

Resultados previstos en la materia	Tipología	Resultados de Formación y Aprendizaje
Identificar elementos y operaciones de simetría	saber saber hacer	A3
Conocer los grupos puntuales de simetría e identificar la simetría molecular	saber saber hacer	A3
Aplicar la simetría molecular a la resolución de problemas en Química Teórica y Computacional	saber hacer	A3
Identificar la simetría de sólidos	saber hacer	A3

**Contenidos**

Tema	
1. Simetría molecular	Operaciones y elementos de simetría Grupos puntuales de simetría Representaciones matriciales Gran teorema de ortogonalidad Operadores de proyección
2. Aplicaciones de la simetría en Química Cuántica	OM Hückel Vibración molecular Complejos organometálicos
3. Simetría en sólidos cristalinos	Estructuras cristalinas Simetría espacial Estructuras isotropas e anisotropas Redes recíprocas

**Planificación**

	Horas en clase	Horas fuera de clase	Horas totales
Resolución de problemas y/o ejercicios	20	40	60
Sesión magistral	30	60	90
Pruebas de respuesta corta	0	1	1
Resolución de problemas y/o ejercicios	0	74	74

\*Los datos que aparecen en la tabla de planificación son de carácter orientativo, considerando la heterogeneidad de alumnado

### Metodologías

	Descripción
Resolución de problemas y/o ejercicios	Resolución por los profesores de problemas y ejercicios modelo
Sesión magistral	Exposición por los profesores de los contenidos teóricos esenciales

### Atención personalizada

Pruebas	Descripción
Pruebas de respuesta corta	Tutorías a través de la plataforma moodle
Resolución de problemas y/o ejercicios	Tutorías a través de la plataforma moodle

### Evaluación

	Descripción	Calificación
Pruebas de respuesta corta	Prueba a través de moodle	30
Resolución de problemas y/o ejercicios	Entrega de ejercicios y problemas	70

### Otros comentarios sobre la Evaluación

La segunda convocatoria se evaluará por el mismo procedimiento

### Fuentes de información

F.A. Cotton, **La teoría de grupos aplicada a la Química,**

I.N. Levine, **Espectroscopía molecular,**

A. Requena y J. Zúñiga, **Espectroscopía,**

Dove, **Structure and Dynamics,**

Hammond, **The Basic of Crystallography and Diffraction,**

Chrtsman, **Fundamentals of Solid State Physics,**

Ashcroft, Mermin, **Solid State Physics,**

C. Kittel, **Introducción a la Física del Estado Sólido,**

### Recomendaciones

**DATOS IDENTIFICATIVOS****Métodos Avanzados de la Química Cuántica**

Asignatura	Métodos Avanzados de la Química Cuántica			
Código	V11M030V01214			
Titulación	Máster Universitario en Química Teórica y Modelización Computacional. R.D. 1393/2007			
Descriptores	Creditos ECTS	Seleccione	Curso	Cuatrimestre
	5	OP	1	2c
Lengua Impartición				
Departamento	Química física			
Coordinador/a	Flores Rodriguez, Jesus Ramon			
Profesorado	Flores Rodriguez, Jesus Ramon			
Correo-e	flores@uvigo.es			

----- GUÍA DOCENTE NO PUBLICADA -----