



## Facultad de Química

### (\*)Facultade de Química

(\*)

Os estudos para exercer a profesión de químico teñen ampla tradición na Universidade de Vigo. Dende os primeiros albores dos campus universitarios de Vigo e Ourense, hai máis de 30 anos, a docencia da Química tivo un papel relevante coa oferta do primeiro ciclo da Licenciatura. A reordenación do Sistema Universitario de Galicia nos anos 90 e o actual proceso de implantación do Espazo Europeo de Educación Superior (EEES) modificaron formalmente a oferta de titulacións, pero non o espírito pioneiro dos químicos na procura dun mellor servizo á sociedade.



### Enlace á páxina web da Facultade de Química:

<http://quimica.uvigo.es>

### Titulacións impartidas no centro

- Grao en Química
- Másteres e Doutoramentos:
  - Química Avanzada / Ciencia e Tecnoloxía Química (interuniversitario con *Mención hacia la Excelencia*)
  - Química Teórica e Modelización Computacional (interuniversitario con *Mención hacia la Excelencia*)
  - Ciencia e Tecnoloxía de Coloides e Interfases (interuniversitario con *Mención hacia la Excelencia*)
- Máster profesionalizante:
  - Ciencia e Tecnoloxía de Conservación de Produtos da Pesca
- Licenciatura en Química

### 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.

A Facultade dispón de Aula de Informática e Aula de Videoconferencia, situadas no bloque E, planta baixa.

Ademais, o edificio de Ciencias Experimentais conta cos 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)
- Biblioteca (Edificio anexo)

**(\*)Calendario académico**(\*) 

Calendario do curso 2012-13 na Facultade de Química

**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				
Departamento	Química física			
Coordinador/a	Perez Juste, Ignacio			
Profesorado	Flores Rodriguez, Jesus Ramon Mosquera Castro, Ricardo Antonio Perez Juste, Ignacio			
Correo-e	uviqpij@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 espectroscópicas	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	25	20	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 y Modelización Computacional. R.D. 1393/2007			
Descriptores	Creditos ECTS	Seleccione	Curso	Cuatrimestre
	5	OP	1	1c
Lengua	Castellano			
Impartición	Gallego			
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	
A1	(*)Adquirir formación en los métodos de la Química Teórica
A3	(*)Aplicar los métodos teóricos y de modelización a sistemas químicos en general
B7	(*)Ser capaz de obtener y manejar bibliografía científico técnica

**Competencias de materia**

Resultados previstos en la materia	Tipología	Resultados de Formación y Aprendizaje
Obtener o demostrar la capacidad de manejar el lenguaje básico de la estructura y enlace químicos de las moléculas, tanto inorgánicas como orgánicas, incluyendo las interacciones moleculares no enlazadas.	saber hacer	A1
Obtener o demostrar la capacidad de manejar el lenguaje básico de la Química Teórica y Computacional en relación con el objetivo anterior.	saber hacer	A1
Obtener o demostrar conocimiento básico del cálculo de propiedades termodinámicas a partir de conceptos estadísticos.	saber hacer	A3 B1
Obtener o demostrar la capacidad de manejar el lenguaje básico de la estructura, enlace y estructura electrónica en sistemas químicos.	saber hacer	A1 B1
Obtener o demostrar la capacidad de manejar el lenguaje básico de las propiedades eléctricas y magnéticas.	saber hacer	A1 B1

**Contenidos**

Tema
Conceptos básicos de estructuras moleculares y enlace. Conceptos de periodicidad química. Nomenclatura básica en química molecular.
Conceptos de Química cuántica
Conceptos de Termoestadística
Conceptos de Óptica Física
Estructura electrónica en sistemas químicos.
Propiedades eléctricas y magnéticas

**Planificación**

	Horas en clase	Horas fuera de clase	Horas totales
Resolución de problemas y/o ejercicios	8	10	18

Resolución de problemas y/o ejercicios de forma autónoma	0	30	30
Sesión magistral	15	50	65
Resolución de problemas y/o ejercicios	2	10	12

\*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 de ejercicios de forma individual o en grupo con la supervisión del profesor.
Resolución de problemas y/o ejercicios de forma autónoma	Resolución autónoma de problemas prácticos en grupo o individualmente.
Sesión magistral	El profesor expondrá los conceptos básicos, y aplicaciones prácticas, y una parte práctica, en la que el estudiante aprenderá a través de la resolución de casos prácticos.

### Atención personalizada

Metodologías	Descripción
Sesión magistral	El profesor realizará tutorías individuales o con grupos reducidos sobre cuestiones puntuales que los estudiantes puedan plantear.
Resolución de problemas y/o ejercicios	El profesor realizará tutorías individuales o con grupos reducidos sobre cuestiones puntuales que los estudiantes puedan plantear.
Resolución de problemas y/o ejercicios de forma autónoma	El profesor realizará tutorías individuales o con grupos reducidos sobre cuestiones puntuales que los estudiantes puedan plantear.

### Evaluación

	Descripción	Calificación
Resolución de problemas y/o ejercicios	Se basará en los ejercicios, problemas y discusión de los mismos que se irá realizando durante las sesiones presenciales del curso.	30
Resolución de problemas y/o ejercicios de forma autónoma	Se basará en los ejercicios, problemas que el estudiante tendrá que realizar de forma autónoma y discusión con el profesor de la solución de estos ejercicios.	30
Resolución de problemas y/o ejercicios	Resolución de ejercicios teóricos prácticos en un examen	40

### Otros comentarios sobre la Evaluación

#### Convocatoria extraordinaria

Se realizará un examen final único que será de carácter teórico y que abarcará los contenidos de toda la asignatura. La puntuación en la convocatoria extraordinaria se realizará en base a los siguientes porcentajes:

- 70% el examen final,
- 30% el trabajo individual

### Fuentes de información

K.W. Whiten, K.D. Gailey y R.E. Davis. *Química general* (3aed.). McGraw-Hill. México (1992).

H. Petrucci y W.S. Harwood. *Química general. Principios y aplicaciones modernas* (8aed.). Prentice Hall. Madrid (2003).

Atkins, P.W. y Friedman, R.S. Oxford U.P. (2003) *Molecular Quantum Mechanics*. Oxford U.P. (2003).

F Jensen. *Introduction to Computational Chemistry*. Wiley. New York (1999).

Christopher J. Cramer. *Essentials of Computational Chemistry*. John Wiley and Sons. New York. (2004).

T. Engel y P. Reid. *Química Física*. Pearson Educación S.A., (2006).

P.W. Atkins. *Química Física*. Ed. Omega, (1999)

---

## **Recomendaciones**

---



**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 Rodriguez, Ana Maria			
Profesorado	Graña Rodriguez, 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	7	21	28
Resolución de problemas e/ou exercicios	14	56	70
Resolución de problemas e/ou exercicios	4	24	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 ejercicios

---

---

**Avaliación**

---

## Descripción

## Calificación

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

---

100

---

**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	Seleccione	Curso	Cuatrimestre
	5	OB	1	An
Lengua Impartición				
Departamento	Química física			
Coordinador/a	Flores Rodriguez, Jesus Ramon			
Profesorado	Flores Rodriguez, Jesus Ramon			
Correo-e	flores@uvigo.es			
Web	http://faiatic.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 saber hacer	A1 A2 A3 B2 B5 B6 B1
(*)Manejar diversas matrices densidad, índices de deslocalización y conceptos relacionados con los métodos NBO y QTAIM	saber saber hacer	A1 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	9	31.05	40.05
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>	
	Descripción
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>	
Metodologías	Descripción
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>		
	Descripción	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 de la Reacción Química**

Asignatura	Dinámica de la Reacción Química			
Código	V11M030V01204			
Titulación	Máster Universitario en Química Teórica y Modelización Computacional. R.D. 1393/2007			
Descriptores	Creditos ECTS	Seleccione	Curso	Cuatrimestre
	5	OP	1	An
Lengua Impartición				
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://fatic.uvigo.es">http://fatic.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
Presentar los métodos experimentales de la Cinética y de la Dinámica Química.	saber	A1 A2
Presentar la Teoría de Colisiones y emplearla para obtener expresiones aproximadas de los coeficientes cinéticos en reacciones bimoleculares	saber	A1 A2 A3
Presentar y desarrollar la teoría del complejo activado y aplicarla para justificar efectos isotópicos.	saber	A1 A2 A3
Presentar la teoría RRKM para las reacciones unimoleculares	saber	A1 A2 A3

Discutir el fenómeno de la catálisis y sus tipos	saber	A1 A2 A3
Presentar los aspectos básicos de la Fotoquímica Molecular incluyendo los procesos de transferencia de energía.	saber	A1 A2 A3
Analizar algunos tipos básicos de reacciones: ion-molécula, transferencia de carga, reacciones entre radicales, etc.	saber hacer	A3 A4 A5 A6 A1 A2
Discutir los principios de la integración de sistemas complejos de ecuaciones cinéticas	saber hacer	A4 A5 A6 A1 A2 B1 B2 B3 B4 B5 B6 B1
Aplicar los conocimientos a reacciones de interés en síntesis orgánica	saber saber hacer	A3 B4 B5 B6 B1
Aplicar los conocimientos a reacciones de interés biológico	saber saber hacer	A4 B4 B5 B6 B1
Aplicar los conocimientos a reacciones de interés atmosférico y astrofísico	saber saber hacer	A6 B4 B5 B6 B1

## Contenidos

### 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: Aspectos Experimentales

- 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 bioquímico.

(\*) (\*)

(\*)- Superficies de energía potencial: aspectos básicos. (\*)

(\*)- Dinámica de la Reacción Química: Aspectos Experimentales (\*)

(\*)- Procesos elementales en Fotoquímica (\*)

(\*)- Reacciones en fases condensadas (\*)

(\*)- Aplicaciones a reacciones de interés astrofísico y atmosférico (\*)



(\*)- Aplicaciones a reacciones de interés bioquímico.

(\*)

### Planificación

	Horas en clase	Horas fuera de clase	Horas totales
Sesión magistral	6	0	6
Trabajos tutelados	17	0	17
Seminarios	8	30	38
Pruebas de tipo test	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	Sesiones Expositivas en que se presentará y discutirá el material previamente suministrado a los alumnos
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	Se analizarán los resultados de los ejercicios y análisis propuestos en las sesiones expositivas.

### Atención personalizada

Metodologías	Descripción
Seminarios	En forma de tutorías. 
Trabajos tutelados	En forma de tutorías. 

### Evaluación

	Descripción	Calificación
Trabajos tutelados	(*)Se puntúan los informes presentados	50
Seminarios	(*)Se valorarán las respuestas proporcionadas en los seminarios	20
Pruebas de tipo test	Sencillas preguntas de tipo test	30

### Otros comentarios sobre la Evaluación

### Fuentes de información

### Recomendaciones

#### Asignaturas que continúan el temario

Dinámica Química y Molecular y Modelización por ordenador/V11M030V01102

#### Asignaturas que se recomienda cursar simultáneamente

Dinámica/V11M030V01208

Estados de Agregación/V11M030V01205

Estructura Electrónica/V11M030V01203

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

Asignatura	Estados de Agregación			
Código	V11M030V01205			
Titulación	Máster Universitario en Química Teórica y Modelización Computacional. R.D. 1393/2007			
Descriptores	Creditos ECTS	Seleccione	Curso	Cuatrimestre
	5	OP	1	An
Lengua Impartición	Química física			
Departamento	Química física			
Coordinador/a	Estevez Valcarcel, Carlos Manuel			
Profesorado	Estevez Valcarcel, Carlos Manuel Hermida Ramon, Jose Manuel			
Correo-e	cestevez@uvigo.es			

----- GUÍA DOCENTE NO PUBLICADA -----

**DATOS IDENTIFICATIVOS****Fundamentos Matemáticos da Química Teórica**

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

Asignatura	Técnicas Computacionales y Cálculo Numérico			
Código	V11M030V01207			
Titulación	Máster Universitario en Química Teórica y Modelización Computacional. R.D. 1393/2007			
Descriptores	Creditos ECTS	Seleccione	Curso	Cuatrimestre
	6	OB	1	2c
Lengua	Castellano			
Impartición	Inglés			
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	
A2	(*)Adquirir formación en los métodos de modelización
A3	(*)Aplicar los métodos teóricos y de modelización a sistemas químicos en general
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
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
Formar a los alumnos en el manejo de las técnicas más usuales de programación en física y en química y familiarizarlo con las herramientas de cálculo esenciales en estas áreas. El alumno deberá ser capaz de desarrollar programas eficientes en Fortran con el fin de utilizar dichas herramientas en su trabajo cotidiano.	saber hacer	A2 A3 B1 B2 B3 B6 B1

**Contenidos**

Tema	
Algoritmos y Programación.	Nociones básicas. Métodos avanzados
Programación FORTRAN.	Programas Simples. Programación en Modulos. Programas complejos.
Cálculo matricial.	Nociones básicas. Diagonalización.
Cálculo Integral.	Nociones básicas. Métodos avanzados.
Búsqueda de ceros y optimización de funciones.	Métodos básicos. Algoritmos.
Análisis multivariante.	Dos variables. Varias variables.
Nociones de paralelización.	Introducción a la paralelización

**Planificación**

	Horas en clase	Horas fuera de clase	Horas totales
Seminarios	12	40	52
Prácticas en aulas de informática	32	46	78
Resolución de problemas y/o ejercicios	0	20	20

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

### Metodologías

	Descripción
Seminarios	Con posterioridad a las clases expositivas, se realizarán seminarios online para discutir los resultados obtenidos en los trabajos propuestos, las dudas sobre las metodologías empleadas, y supervisar la preparación de los informes elaborados por los estudiantes.
Prácticas en aulas de informática	La docencia se impartirá en un aula de informática. Las clases, en sesiones de dos horas, incluirán una introducción teórica breve, en la que el profesor expondrá los conceptos básicos, y aplicaciones prácticas, y una parte práctica, en la que el estudiante aprenderá a través de la resolución de casos prácticos.
	Se utilizará las distintas herramientas que ofrece la plataforma moodle ( <a href="http://www.uam.es/moodle">http://www.uam.es/moodle</a> ). Publicación de contenidos de la asignatura, herramientas de trabajo en grupo: foros de discusión y wiki, correo electrónico

### Atención personalizada

Metodologías	Descripción
Prácticas en aulas de informática	El profesor realizará tutorías individuales o con grupos reducidos sobre cuestiones puntuales que los estudiantes puedan plantear.
Seminarios	El profesor realizará tutorías individuales o con grupos reducidos sobre cuestiones puntuales que los estudiantes puedan plantear.

### Evaluación

	Descripción	Calificación
Seminarios	Los conocimientos adquiridos por el estudiante serán evaluados a lo largo de todo el curso, intentando que el estudiante avance de forma regular y constante en la asimilación de los contenidos de la asignatura.	40
	Discusión de los trabajos/ejercicios realizados que se irá realizando durante el curso.	
Resolución de problemas y/o ejercicios	Los conocimientos adquiridos por el estudiante serán evaluados a lo largo de todo el curso, intentando que el estudiante avance de forma regular y constante en la asimilación de los contenidos de la asignatura. Corrección de los ejercicios, trabajos que el estudiante irá realizando durante el curso.	60

### Otros comentarios sobre la Evaluación

#### Convocatoria extraordinaria

Se realizará un examen final único que será de carácter teórico y que abarcará los contenidos de toda la asignatura. La puntuación en la convocatoria extraordinaria se realizará en base a los siguientes porcentajes:

- 70% el examen final,
- 30% el trabajo individual

### Fuentes de información

Ingeniería del software: Diseño estructurado. J.A. Calco Manzasno y L.Fernández Sanz. Univ. Politécnica de Madrid (Madrid) 1995

S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling and B. P. Flannery, Numerical Recipes in Fortran (second edition, Univ. Press, Cambridge, 2003)

---

## **Recomendaciones**

---

**DATOS IDENTIFICATIVOS****Dinámica**

Asignatura Dinámica  
Código V11M030V01208  
Titulación Máster Universitario en Química Teórica e 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

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****Métodos da Química Cuántica e da Mecánica Estatística**

Asignatura	Métodos da Química Cuántica e da Mecánica Estatística			
Código	V11M030V01209			
Titulación	Máster Universitario en Química Teórica e Modelización Computacional. R.D. 1393/2007			
Descritores	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			
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****Sólidos**

Asignatura Sólidos

Código V11M030V01210

Titulación Máster Universitario en Química Teórica e 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

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****Estados Excitados**

Asignatura	Estados Excitados			
Código	V11M030V01211			
Titulación	Máster Universitario en Química Teórica e 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			
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****(\*)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 e Modelización Computacional. R.D. 1393/2007			
Descriptor	Creditos ECTS	Selección	Curso	Cuatrimestre
	9	OB	1st	2nd
Lengua	Spanish			
Impartición				
Departamento				
Coordinador/a	Estevez Valcarcel, Carlos Manuel			
Profesorado	Estevez Valcarcel, Carlos Manuel			
Correo-e	cestevez@uvigo.es			
Web				
Descripción general				

**Competencias**

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

**Learning aims**

Resultados previstos en la materia	Tipología	Resultados de Formación y Aprendizaje
To identify elements and operations of symmetry	know Know How	A3
To know the point groups of symmetry and identify the molecular symmetry	know Know How	A3
To apply molecular symmetry to the resolution of problems in Theoretical and Computational Chemistry	Know How	A3
To Identify the symmetry of solids	Know How	A3

**Contents**

Tema	
1. Molecular symmetry	Operations and symmetry elements. Symmetry point groups. Matrix representations. Big orthogonality theorem. Projection operators
2. Applications of symmetry in Quantum Chemistry	OM Hückel. Molecular vibration. Organometallic complexes
3. Symmetry in crystalline solids	Crystal Structures. Spatial symmetry. Isotropic and anisotropic structures. Reciprocal lattices.

**Planning**

	Horas en clase	Horas fuera de clase	Horas totales
(*) Resolución de problemas e/ou ejercicios	34	68	102
(*) Sesión maxistral	30	60	90
(*) Probas de resposta curta	0	1	1
(*) Resolución de problemas e/ou ejercicios	0	32	32

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

**Methodologies**

Descripción

(\*) Resolución de problemas e/ou ejercicios

(\*)Resolución polos profesores de exercicios e problemas

(\*)Sesión maxistral

(\*)Exposición polos profesores dos contidos teóricos esenciais

### Personalized attention

Pruebas	Descripción
Probas de resposta curta	
Resolución de problemas e/ou exercicios	

### Assessment

	Descripción	Calificación
(*)Probas de resposta curta	(*)Proba a través de moodle	30
(*)Resolución de problemas e/ou exercicios	(*)Entrega de exercicios e problemas	70

### Otros comentarios sobre la Evaluación

### Sources of information

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,**

### Recommendations

**DATOS IDENTIFICATIVOS****Métodos Avanzados da Química Cuántica**

Asignatura	Métodos Avanzados da Química Cuántica			
Código	V11M030V01214			
Titulación	Máster Universitario en Química Teórica e 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			
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**