



## 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

## Grado en Química

### Asignaturas

#### Curso 2

Código	Nombre	Cuatrimestre	Cr.totales
V11G200V01301	Física III	1c	6
V11G200V01302	Química analítica I	1c	9
V11G200V01303	Química física I	1c	6
V11G200V01304	Química orgánica I	1c	9
V11G200V01401	Herramientas informáticas y de comunicación en química	2c	6
V11G200V01402	Métodos numéricos en química	2c	6
V11G200V01403	Química física II	2c	9
V11G200V01404	Química inorgánica I	2c	9

**DATOS IDENTIFICATIVOS****Física III**

Asignatura	Física III			
Código	V11G200V01301			
Titulación	Grado en Química			
Descriptores	Creditos ECTS	Seleccione	Curso	Cuatrimstre
	6	OB	2	1c
Lengua	Castellano			
Impartición				
Departamento	Física aplicada Química física			
Coordinador/a	Mosquera Castro, Ricardo Antonio			
Profesorado	Martinez Piñeiro, Manuel Mosquera Castro, Ricardo Antonio			
Correo-e	mosquera@uvigo.es			
Web				
Descripción general	(*)A materia pretende ser unha introducción á Mecánica Cuántica e a Mecánica Estadística orientada as súas aplicacións en Química.			

**Competencias de titulación**

Código	
A3	Demostrar conocimiento y comprensión de hechos esenciales, conceptos, principios y teorías en: principios de la mecánica cuántica y su aplicación en la descripción de la estructura y las propiedades de átomos y moléculas
A14	Demostrar conocimiento y comprensión de hechos esenciales, conceptos, principios y teorías en: relación entre propiedades macroscópicas y propiedades de átomos y moléculas individuales, incluyendo las macromoléculas
A19	Aplicar dicho conocimiento y comprensión a la resolución de problemas cuantitativos y cualitativos de naturaleza básica
A20	Evaluar, interpretar y sintetizar datos e información química
A22	Procesar datos y realizar cálculo computacional relativo a información y datos químicos
A23	Presentar material y argumentos científicos de manera oral y escrita a una audiencia especializada
B4	Buscar y gestionar información procedente de distintas fuentes
B6	Manejar las matemáticas, incluyendo aspectos tales como análisis de errores, estimaciones de órdenes de magnitud, uso correcto de unidades y modos de presentación de datos
B7	Aplicar los conocimientos teóricos a la práctica
B9	Trabajar de forma autónoma
B14	Analizar y sintetizar información y obtener conclusiones
B15	Evaluar de modo crítico y constructivo su entorno y a sí mismo

**Competencias de materia**

Resultados previstos en la materia	Resultados de Formación y Aprendizaje	
(*)	A3	B14
(*)	A3	B14
(*)	A3	B14
(*)	A3	B14 B15
(*)	A3 A19	B9 B14
(*)	A3 A19	B9 B14
(*)	A3 A19	B6 B14
(*)	A3 A19	B6 B14
(*)	A3 A19	B6 B14
(*)	A3 A19 A20	B6 B14
(*)	A3 A19 A20 A22 A23	B6 B9 B14 B15

(*)	A14 A20 A22 A23	B6 B14
(*)Aplicar la estadística de Maxwell Boltzmann al caso de los gases ideales mono y poliatómicos para estimar propiedades termodinámicas a partir de propiedades microscópicas como masa, geometría molecular y frecuencias de vibración.	A14 A19	B4 B6 B7

## Contenidos

Tema	
(*)Campo electromagnético: ecuaciones de Maxwell.	(*)Corriente de desplazamiento Ecuaciones de Maxwell. Energía Ecuación de ondas
(*)Cuantización de la radiación. Dualidad onda-corpúsculo	(*)Catástrofe ultravioleta Efecto fotoeléctrico Rayos X. Condición de Bragg. Radiación de frenado efecto Compton Dualidad onda-corpúsculo
(*)Principios de Mecánica Cuántica	(*)Limitaciones de la Física Clásica y origen de la Mecánica Cuántica Hipótesis de De Broglie Relación de indeterminación Postulados de la Mecánica Cuántica Teorema del virial
(*)Estudio mecano-cuántico de sistemas modelo	(*)Introducción Partícula en una caja de potencial Oscilador armónico Rotor rígido
(*)Métodos aproximados	(*)Introducción. Método de variaciones. Método de perturbaciones.
(*)Átomos hidrogénicos	(*)Introducción. Resolución de la parte radial de la ecuación de Schrödinger. Orbitales atómicos. Espín electrónico. Acoplamiento espín-órbita. Estructura hiperfina. Espectros atómicos.
Átomos polielectrónicos	Aproximación de electrones independientes Principio de antisimetría Método SCF-HF Términos electrónicos Espectros atómicos
Mecánica Estadística	Colectivo canónico. Función de partición canónica para un sistema de partículas que no interactúan. Función de partición canónica de un gas ideal puro. Ley de distribución de Boltzmann para moléculas no interactuantes. Termodinámica estadística para gases ideales monoatómicos y diatómicos. Termodinámica estadística de gases ideales poliatómicos

## Planificación

	Horas en clase	Horas fuera de clase	Horas totales
Sesión magistral	27	44.5	71.5
Resolución de problemas y/o ejercicios	13	45.5	58.5
Pruebas de respuesta corta	4	6	10
Pruebas de respuesta larga, de desarrollo	4	6	10

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

## Metodologías

	Descripción
Sesión magistral	(*)Presentación dos temas por parte do profesor.
Resolución de problemas y/o ejercicios	(*)Resolución individual ou en grupo de problemas e cuestións, tanto titorizado polo profesor na aula como traballo autónomo do alumno.

## Atención personalizada

Metodologías	Descripción
Sesión magistral	Respostas as preguntas relacionadas coa materia que plantexen os alumnos nas clases de resolución de problemas e nas titorías. Os alumnos coñecerán dende principio de curso os horarios de titorías de tódolos profesores da materia. Nas titorías os alumnos poderán revisa-los seus exames. Ademáis prestarase atención individualizada ós alumnos que se encarguen da elaboración parcial de seminarios.
Resolución de problemas y/o ejercicios	Respostas as preguntas relacionadas coa materia que plantexen os alumnos nas clases de resolución de problemas e nas titorías. Os alumnos coñecerán dende principio de curso os horarios de titorías de tódolos profesores da materia. Nas titorías os alumnos poderán revisa-los seus exames. Ademáis prestarase atención individualizada ós alumnos que se encarguen da elaboración parcial de seminarios.
Pruebas	Descripción
Pruebas de respuesta larga, de desarrollo	
Pruebas de respuesta corta	

Evaluación		
	Descripción	Calificación
Resolución de problemas y/o ejercicios	Básicamente se centrará en la resolución de ejercicios en el aula. No obstante, se podrá también pedir al alumno que entregue ejercicios propuestos y que el resuelva de manera autónoma. En este caso el profesor podrá pedir al alumno que le explique individualmente como ha resuelto el ejercicio.	10
Pruebas de respuesta corta	Celebraranse probas de resposta curta polo total da asignatura que poden permiti-lo alumno supera-la asignatura.	45
Pruebas de respuesta larga, de desarrollo	O remata-lo curso celebraranse unha proba completa na que os alumnos que o desexen poderán repetir aqueles aspectos que non superaron nas diversas probas curtas.	45

#### Otros comentarios sobre la Evaluación

Durante el curso se realizarán tres pruebas cortas que contendrán problemas y cuestiones. De manera voluntaria, los alumnos podrán obtener puntos adicionales participando en la resolución de ejercicios en los seminarios o de manera activa en las clases. También podrán presentarse a un examen final, que incluirá toda la materia, que les permitirá aumentar la puntuación alcanzada en los parciales.

Todo alumno deberá alcanzar al menos una calificación de 4 sobre 10 en el global de sus pruebas escritas para poder acumular la puntuación correspondiente a resolución de ejercicios.

En la segunda convocatoria se mantendrá la puntuación alcanzada mediante la resolución de ejercicios. Este examen se valorará de manera semejante al examen final.

El alumno que no se presente a ninguna prueba durante el curso será calificado en primera convocatoria como no presentado.

#### Fuentes de información

R. Eisberg, y R. Resnick, **Física Cuántica**, 1983,  
 J. Bertrán y otros, **Química Cuántica**, 2000,  
 I. N. Levine, **Fisicoquímica**, 2004,  
 M. Alonso y E.J. Finn, **Física**, 1976,

#### Recomendaciones

##### Asignaturas que continúan el temario

Química física II/V11G200V01403

##### Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente

Física: Física I/V11G200V01102

Física: Física II/V11G200V01201

Matemáticas: Matemáticas I/V11G200V01104

Matemáticas: Matemáticas II/V11G200V01203

**DATOS IDENTIFICATIVOS****Química analítica I**

Asignatura	Química analítica I			
Código	V11G200V01302			
Titulación	Grado en Química			
Descriptores	Creditos ECTS	Selección	Curso	Cuatrimestre
	9	OB	2	1c
Lengua	Castellano			
Impartición				
Departamento	Química analítica y alimentaria			
Coordinador/a	Perez Cid, Benita			
Profesorado	Lavilla Beltran, Maria Isela Perez Cid, Benita			
Correo-e	benita@uvigo.es			
Web				
Descripción general	En esta asignatura se pretende que el alumno alcance una visión general del análisis químico cualitativo y cuantitativo, tanto en el aspecto teórico como aplicado, lo que le servirá de base para el aprendizaje de otras materias que se impartirán en cursos posteriores, particularmente en lo referente al diseño y aplicación de métodos analíticos más complejos.			

**Competencias de titulación**

Código	
A1	Demostrar conocimiento y comprensión de hechos esenciales, conceptos, principios y teorías en: aspectos principales de la terminología química, nomenclatura, conversiones y unidades.
A2	Demostrar conocimiento y comprensión de hechos esenciales, conceptos, principios y teorías en: tipos de reacción química y sus principales características asociadas
A4	Demostrar conocimiento y comprensión de hechos esenciales, conceptos, principios y teorías en: fundamentos y herramientas utilizadas en la resolución de problemas analíticos y en la caracterización de sustancias químicas
A17	Demostrar conocimiento y comprensión de hechos esenciales, conceptos, principios y teorías en: metrología de los procesos químicos, incluyendo la gestión de la calidad
A18	Demostrar conocimiento y comprensión de hechos esenciales, conceptos, principios y teorías en: principios de electroquímica
A19	Aplicar dicho conocimiento y comprensión a la resolución de problemas cuantitativos y cualitativos de naturaleza básica
A20	Evaluar, interpretar y sintetizar datos e información química
A21	Reconocer e implementar buenas prácticas científicas de medida y experimentación
A25	Manejar con seguridad sustancias químicas, considerando sus propiedades físicas y químicas, incluyendo la valoración de cualquier riesgo específico asociado con su uso
A26	Realizar procedimientos habituales de laboratorio y utilizar la instrumentación en trabajo sintético y analítico
A28	Interpretar datos derivados de las observaciones y mediciones del laboratorio en términos de su significado y relacionarlos con la teoría adecuada
A29	(*)Demostrar habilidades para os cálculos numéricos e a interpretación dos datos experimentais, con especial énfase na precisión e a exactitude
B1	Comunicarse de forma oral y escrita en al menos una de las lenguas oficiales de la Universidad
B3	Aprender de forma autónoma
B4	Buscar y gestionar información procedente de distintas fuentes
B5	Utilizar las tecnologías de la información y de las comunicaciones y manejar herramientas informáticas básicas
B6	Manejar las matemáticas, incluyendo aspectos tales como análisis de errores, estimaciones de órdenes de magnitud, uso correcto de unidades y modos de presentación de datos
B7	Aplicar los conocimientos teóricos a la práctica
B9	Trabajar de forma autónoma
B12	Planificar y gestionar adecuadamente el tiempo
B14	Analizar y sintetizar información y obtener conclusiones

**Competencias de materia**

Resultados previstos en la materia	Resultados de Formación y Aprendizaje	
Reconocer la importancia de la Química Analítica en función de sus objetivos.	A4	B1
	A19	B3
	A20	B4

Identificar las etapas fundamentales del proceso analítico como metodología para la resolución de problemas y seleccionar con criterio los distintos métodos de análisis.	A4 A19 A20	B1 B3 B4 B14
Describir las propiedades analíticas básicas (exactitud, precisión, sensibilidad y selectividad) y los tipos de errores que pueden afectar a los resultados experimentales.	A19 A20	B1 B3 B4 B6 B14
Describir los aspectos básicos del muestreo y preparación de la muestra para la determinación de sus componentes.	A4 A19 A20	B1 B3 B4 B14
Manejar la calibración, uso y limpieza del material utilizado en el laboratorio analítico.	A21 A26	B7 B9 B12
Preparar disoluciones de concentración exacta (patrón primario) y aproximada (patrón secundario y reactivos auxiliares) en función de su finalidad y manejar adecuadamente las unidades de concentración.	A1 A17 A21 A25	B4 B6 B7 B9 B12
Aplicar los conocimientos básicos de separación e identificación de especies químicas en disolución a la resolución de un problema analítico.	A2 A4 A19 A21 A26	B4 B7 B9 B12 B14
Describir los principios del análisis químico cuantitativo (volumétrico y gravimétrico) y sus limitaciones experimentales.	A2 A4 A20	B1 B3 B4
Identificar y evaluar la posible interacción entre reacciones concurrentes ácido-base, de complejación, precipitación y redox.	A2 A18 A19 A20	B1 B3 B4 B7 B9 B12 B14
Elaborar e interpretar curvas de valoración ácido-base, de formación de complejos, de precipitación y redox y saber seleccionar los indicadores más adecuados.	A2 A18 A19 A20	B1 B3 B4 B7 B9 B12 B14
Describir los fundamentos del análisis gravimétrico y los factores que influyen en la pureza de los precipitados.	A2 A20	B1 B3 B4 B14
Llevar a cabo, en el laboratorio, la precipitación y la separación por filtración en las determinaciones gravimétricas.	A2 A17 A19 A21 A25 A26 A28	B4 B7 B9 B12
Manejar correctamente las técnicas gravimétricas y volumétricas, incluyendo el uso adecuado del material necesario en cada caso.	A17 A19 A20 A21 A26	B4 B7 B9 B12
Manejar el cálculo sistemático en el análisis volumétrico (valoraciones directas, por retroceso e indirectas) y gravimétrico y saber interpretar los resultados obtenidos.	A20 A28 A29	B3 B5 B6 B7 B14

## Contenidos

Tema

Tema 1: Química Analítica y proceso analítico.	Introducción a la Química Analítica. Clasificación de los métodos de análisis. El proceso analítico como metodología para la resolución de problemas analíticos.
Tema 2: Muestreo y preparación de la muestra.	Muestra representativa. Preparación de la muestra para el análisis. Descomposición y disolución. Introducción a las separaciones analíticas.
Tema 3: Evaluación de los resultados analíticos.	Propiedades analíticas. Errores en Química Analítica: clasificación. Estadística básica aplicada a la expresión de resultados analíticos. Comparación y rechazo de resultados.
Tema 4: Análisis cuantitativo volumétrico y gravimétrico.	Reacciones volumétricas. Disoluciones patrón. Valoraciones directas, por retroceso e indirectas. Formación, propiedades y pureza de los precipitados. Cálculos del análisis gravimétrico y volumétrico.
Tema 5: Volumetrías ácido-base.	Comportamiento de especies monopróticas, polipróticas y anfóteras. Curvas de valoración. Detección del punto final: indicadores ácido-base. Reactivos valorantes. Aplicaciones analíticas.
Tema 6: Volumetrías de formación de complejos.	Estabilidad de los complejos. Reacciones de enmascaramiento. Curvas de valoración. Detección del punto final: indicadores metalocrómicos. Aplicaciones analíticas.
Tema 7: Volumetrías de precipitación.	Factores que afectan a la solubilidad de los precipitados. Curvas de valoración. Detección del punto final: métodos de Mohr, Volhard y Fajans. Aplicaciones analíticas.
Tema 8: Volumetrías de oxidación-reducción.	Factores que modifican el potencial redox. Curvas de valoración. Detección del punto final: indicadores redox e indicadores específicos.
Análisis cualitativo (Laboratorio)	Separación e identificación de especies químicas. (3 sesiones)  Resolución de un problema analítico mediante una sistemática de separación. (2 sesiones)
Análisis gravimétrico (Laboratorio)	Determinación gravimétrica de níquel con dimetilglioxima. (1 sesión)
Volumetrías ácido-base (Laboratorio)	Determinación de la acidez de una muestra de vinagre. (1 sesión)  Determinación de ácido acetilsalicílico en analgésicos. (1 sesión)
Volumetrías de formación de complejos (Laboratorio)	Determinación de la concentración de una disolución de Na <sub>2</sub> -AEDT con Zn (II). (1 sesión)
Volumetrías de precipitación (Laboratorio)	Determinación de la dureza de una muestra de agua. (1 sesión)
Volumetrías de oxidación-reducción (Laboratorio)	Determinación de cloruros en una muestra de agua de mar por el método de Mohr. (1 sesión)
	Determinación de la riqueza en oxígeno de una muestra de H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> comercial. (1 sesión)  Determinación de cloro activo en una muestra de lejía. (1 sesión)

## Planificación

	Horas en clase	Horas fuera de clase	Horas totales
Sesión magistral	27	42	69
Resolución de problemas y/o ejercicios	13	31	44
Prácticas de laboratorio	45.5	4.5	50
Informes/memorias de prácticas	3	34	37
Pruebas de respuesta corta	2	5	7
Pruebas de respuesta larga, de desarrollo	3.5	8	11.5
Pruebas prácticas, de ejecución de tareas reales y/o simuladas.	3.5	3	6.5

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

## Metodologías

	Descripción
Sesión magistral	Son clases teóricas (dos horas a la semana) en las que el profesor ofrecerá una visión global de cada uno de los temas del programa incidiendo, de forma especial, en los aspectos más relevantes y en aquellos que resulten de más difícil comprensión para el alumno. Las clases se desarrollarán de forma interactiva con los alumnos, comentando con ellos el material on-line (disponible en la plataforma Tem@) y la bibliografía más adecuada para la preparación, en profundidad, de cada tema.



Resolución de problemas y/o ejercicios	Cada semana se dedicará una hora (seminario) a la resolución de problemas y/o ejercicios propuestos que servirán para reforzar los conocimientos adquiridos en las clases teóricas. En unas sesiones el profesor explicará a los alumnos los problemas-tipo que le permitan llevar a cabo el planteamiento y resolución de los mismos. En cambio, en otras sesiones, serán los propios alumnos los que resolverán y explicarán en la pizarra los ejercicios propuestos en los boletines (material on-line). Se podrá solicitar a los alumnos que entreguen, de forma individual, algunos de estos ejercicios resueltos, que serán corregidos por el profesor.
Prácticas de laboratorio	Se realizarán experimentos de laboratorio, de forma individual, en sesiones de 3.5 h cada una. El alumno dispondrá de los guiones de prácticas, así como del material de apoyo en la plataforma Tem@, a fin de que pueda tener conocimiento previo de los experimentos a realizar. Durante el desarrollo de las prácticas el alumno elaborará un cuaderno de laboratorio en el que anotará todo lo relativo al experimento realizado (reacciones, procedimientos, observaciones, resultados, etc.).

### Atención personalizada

Metodologías	Descripción
Prácticas de laboratorio	Tiempo dedicado por el profesor para atender a todas las dudas y consultas realizadas sobre la materia, durante el curso. El profesor informará sobre el horario disponible para ello en la presentación de la materia.
Resolución de problemas y/o ejercicios	Tiempo dedicado por el profesor para atender a todas las dudas y consultas realizadas sobre la materia, durante el curso. El profesor informará sobre el horario disponible para ello en la presentación de la materia.
Pruebas	Descripción
Informes/memorias de prácticas	

### Evaluación

	Descripción	Calificación
Resolución de problemas y/o ejercicios	Se valorará la resolución, por parte del alumno, de algunos de los problemas y/o ejercicios propuestos en los boletines, los cuales deben ser entregados al profesor.	15
Prácticas de laboratorio	El profesor realizará un seguimiento del trabajo experimental realizado por el alumno en las sesiones de laboratorio (competencias y destrezas adquiridas). Es importante indicar que es obligatoria la asistencia a las sesiones de laboratorio.	10
Informes/memorias de prácticas	Durante las sesiones de laboratorio, el alumno elaborará un cuaderno en el que refleje el trabajo experimental llevado a cabo (reacciones, procedimientos, observaciones, resultados, etc.). Dicho cuaderno será revisado y evaluado por el profesor.	10
Pruebas de respuesta corta	Se realizará una prueba escrita correspondiente a los cuatro primeros temas del programa. Dicha prueba eliminará materia, en caso de ser aprobada. Los alumnos que no la superen tendrán que examinarse de esta parte en la prueba final.	20
Pruebas de respuesta larga, de desarrollo	Se realizará una segunda prueba escrita correspondiente a los cuatro últimos temas del programa. Los alumnos que no hayan superado la primera prueba se examinarán de toda la materia. Dicha prueba se realizará el día del examen final.	30
Pruebas prácticas, de ejecución de tareas reales y/o simuladas.	Al final de las sesiones de laboratorio, se realizará una prueba práctica (una sesión de laboratorio) que permitirá evaluar las competencias y destrezas adquiridas por el alumno durante las sesiones de laboratorio.	15

### Otros comentarios sobre la Evaluación

#### - Primera Convocatoria:

Para superar la asignatura es obligatorio alcanzar, como mínimo, un 50 % de la calificación asignada a cada una de las partes (teoría y prácticas de laboratorio) siendo necesario, además, aprobar las dos pruebas escritas propuestas y la prueba experimental que tendrá lugar en el laboratorio.

La puntuación correspondiente a la parte práctica de la materia (laboratorio) sólo se computará en la nota final al haber superado la parte teórica.

La participación del alumno en alguno de los actos de evaluación de la materia implicará la condición de "presentado" y, por lo tanto, la asignación de una calificación. Se consideran actos de evaluación la asistencia a clases prácticas de laboratorio (tres o más), la realización de pruebas escritas y la entrega de un 25 % de los trabajos y/o ejercicios encargados por el profesor.

#### - Segunda Convocatoria:

En la convocatoria extraordinaria el alumno tendrá que repetir aquellas pruebas (teórica y/o práctica) que no haya superado en la convocatoria ordinaria. Se conservarán las puntuaciones alcanzadas por el alumno durante el curso en las demás actividades que figuran en el apartado de evaluación.

---

### **Fuentes de información**

J. Guiteras, R. Rubio, G. Fonrodona, **Curso Experimental en Química Analítica**, Síntesis,  
D.A. Skoog, D.M. West, F.J. Holler, S.R. Crouch, **Fundamentos de Química Analítica**, 8ª Ed., Thompson, Madrid,  
D.C. Harris, **Análisis Químico Cuantitativo**, 2ª Ed., Reverté, Barcelona,  
Gary D. Christian, **Química Analítica**, 6ª Ed., McGraw-Hill,

---

### **Recomendaciones**

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

Química analítica II/V11G200V01503  
Química analítica III/V11G200V01601

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

Física III/V11G200V01301  
Química física I/V11G200V01303  
Química orgánica I/V11G200V01304

#### **Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente**

Química, física y biología: Laboratorio integrado I/V11G200V01103  
Química, física y geología: Laboratorio integrado II/V11G200V01202  
Química: Química I/V11G200V01105  
Química: Química II/V11G200V01204

**DATOS IDENTIFICATIVOS****Química física I**

Asignatura	Química física I			
Código	V11G200V01303			
Titulación	Grado en Química			
Descriptor	Creditos ECTS	Seleccione	Curso	Cuatrimestre
	6	OB	2	1c

Lengua

Impartición

Departamento Química física

Coordinador/a Perez Juste, Ignacio

Profesorado Perez Juste, Ignacio

Correo-e uviqpij@uvigo.es

Web [http://http://webs.uvigo.es/qf1\\_web/](http://http://webs.uvigo.es/qf1_web/)

Descripción general La materia Química Física I es uno de los primeros contactos de un estudiante de Química con la Química Física. Esta disciplina estudia las propiedades y el comportamiento de los sistemas químicos empleando los métodos de la Física. En esta materia se aborda el tratamiento macroscópico riguroso de sistemas químicos en equilibrio, sistemas ya introducidos en la materia Química I. Aprovechando el conocimiento básico de los principios de la Termodinámica, se aplicarán a sistemas de interés químico para disponer de una descripción cuantitativa de los mismos. Para este tratamiento cuantitativo es fundamental estar familiarizado con el cálculo diferencial de más de una variable y el cálculo integral de una variable, aspectos abordados en la materia Matemáticas II.

Los conocimientos sobre la descripción macroscópica de los sistemas químicos que se alcanzarán en esta materia se complementan con los contenidos de la Química Física III del tercer curso. La aplicación experimental de estos conocimientos se efectuará en la materia del segundo cuatrimestre Química Física II.

**Competencias de titulación**

Código

A6	Demostrar conocimiento y comprensión de hechos esenciales, conceptos, principios y teorías en: principios de termodinámica y sus aplicaciones en Química
A18	Demostrar conocimiento y comprensión de hechos esenciales, conceptos, principios y teorías en: principios de electroquímica
A19	Aplicar dicho conocimiento y comprensión a la resolución de problemas cuantitativos y cualitativos de naturaleza básica
A20	Evaluar, interpretar y sintetizar datos e información química
A23	Presentar material y argumentos científicos de manera oral y escrita a una audiencia especializada
B1	Comunicarse de forma oral y escrita en al menos una de las lenguas oficiales de la Universidad
B3	Aprender de forma autónoma
B4	Buscar y gestionar información procedente de distintas fuentes
B5	Utilizar las tecnologías de la información y de las comunicaciones y manejar herramientas informáticas básicas
B6	Manejar las matemáticas, incluyendo aspectos tales como análisis de errores, estimaciones de órdenes de magnitud, uso correcto de unidades y modos de presentación de datos
B7	Aplicar los conocimientos teóricos a la práctica
B8	Trabajar en equipo
B9	Trabajar de forma autónoma
B12	Planificar y gestionar adecuadamente el tiempo
B13	Tomar decisiones
B14	Analizar y sintetizar información y obtener conclusiones
B15	Evaluar de modo crítico y constructivo su entorno y a sí mismo

**Competencias de materia**

Resultados previstos en la materia	Resultados de Formación y Aprendizaje	
Emplear el concepto de función de estado para calcular las variaciones de las distintas funciones de estado termodinámicas de una sustancia pura.	A6	B1
	A19	B3
	A20	B4
	A23	B5
		B6
		B7
		B8
		B9
		B12
		B13
		B14
	B15	

Obtener la entropía de una sustancia a partir de medidas calorimétricas	A6 A19 A20 A23	B1 B3 B4 B5 B6 B7 B8 B9 B12 B13 B14 B15
Establecer si un proceso que sufre una sustancia pura es espontáneo o no a partir del cálculo de las variaciones de las propiedades termodinámicas	A6 A19 A20 A23	B1 B3 B4 B5 B6 B7 B8 B9 B12 B13 B14 B15
Manejar tablas termodinámicas para obtener valores de las distintas funciones de estado termodinámicas de reacción y calcular las funciones termodinámicas de reacción a temperaturas distintas	A6 A19 A20 A23	B1 B3 B4 B5 B6 B7 B8 B9 B12 B13 B14 B15
Calcular la función fugacidad para un gas real a partir de su ecuación de estado o bien a partir de medidas experimentales	A6 A19 A20 A23	B1 B3 B4 B5 B6 B7 B8 B9 B12 B13 B14 B15
Calcular la constante termodinámica de reacciones en disolución, a partir de las concentraciones de las especies o a partir de las funciones termodinámicas	A6 A19 A20 A23	B1 B3 B4 B5 B6 B7 B8 B9 B12 B13 B14 B15

Calcular las características termodinámicas de un cambio de fase, y saber el intervalo de aplicabilidad de las ecuaciones empleadas	A6 A19 A20 A23	B1 B3 B4 B5 B6 B7 B8 B9 B12 B13 B14 B15
Calcular las propiedades termodinámicas de una disolución ideal a partir de su composición	A6 A19 A20 A23	B1 B3 B4 B5 B6 B7 B8 B9 B12 B13 B14 B15
Calcular las propiedades coligativas de una disolución a partir de la concentración del soluto y las propiedades del disolvente. Establecer cuándo estos resultados se pueden aplicar a un caso real	A6 A19 A20 A23	B1 B3 B4 B5 B6 B7 B8 B9 B12 B13 B14 B15
Calcular las actividades y coeficientes de actividad de disoluciones no electrolíticas y emplear el modelo adecuado para el cálculo del coeficiente de actividad iónico medio. Obtener este coeficiente a partir de medidas experimentales	A6 A18 A19 A20 A23	B1 B3 B4 B5 B6 B7 B8 B9 B12 B13 B14 B15
Emplear medidas experimentales procedentes de las células galvánicas para determinar funciones de estado de reacción	A6 A18 A19 A20 A23	B1 B3 B4 B5 B6 B7 B8 B9 B12 B13 B14 B15

Determinar la actividad y/o el coeficiente de actividad iónico medio de un electrolito mediante medidas experimentales de FEM de células galvánicas	A6 A18 A19 A20 A23	B1 B3 B4 B5 B6 B7 B8 B9 B12 B13 B14 B15
Analizar la importancia de la interfase y de los distintos fenómenos asociados a ella en los procesos termodinámicos de los sistemas materiales	A6 A19 A20 A23	B1 B3 B4 B5 B6 B7 B8 B9 B12 B13 B14 B15
Establecer la importancia de la tensión superficial y los distintos procesos asociados en función de la naturaleza del sistema	A6 A19 A20 A23	B1 B3 B4 B5 B6 B7 B8 B9 B12 B13 B14 B15
Diferenciar entre procesos de adsorción física y química y describir los modelos empleados para su descripción	A6 A19 A20 A23	B1 B3 B4 B5 B6 B7 B8 B9 B12 B13 B14 B15

## Contenidos

Tema	
Principios de la termodinámica en la química.	Primer principio de la Termodinámica. Energía interna. Entalpía. Capacidades caloríficas. Termoquímica. Segundo principio de la termodinámica. Entropía. Interpretación molecular de la entropía. Tercer principio de la Termodinámica. Cálculo de las variaciones de entropía.
Funciones termodinámicas	Ecuaciones de Gibbs. Relaciones de Maxwell. Cálculo de variaciones de las funciones de estado. Sistemas abiertos. Magnitudes molares parciales. Potencial químico. Potencial químico de un gas ideal. Potencial químico en una mezcla de gases ideales. Potencial químico de los gases reales. Fugacidad.
Equilibrio químico entre gases.	Condiciones de equilibrio termodinámico. Grado de avance. Constante de equilibrio termodinámica en reacciones en fase gasosa. Influencia de la temperatura en la constante de equilibrio. Factores que afectan a la posición del equilibrio: principio de Le Châtelier.

Equilibrio de fases en sistemas de un componente.	Conceptos de componente, fase y grado de libertad. Condiciones de equilibrio entre fases. Regla de las fases. Cambios de fase de primer orden. Ecuaciones de Clapeyron y Clausius-Clapeyron. Cambios de fase de orden superior.
Disoluciones ideales.	Volúmenes molares parciales. Ecuación de Gibbs-Duhem. Disolución ideal: Ley de Raoult. Diagramas P-x y T-x. Disolución diluida ideal: Ley de Henry. Propiedades coligativas.
Disoluciones no ideales.	Desviaciones de la ley de Raoult. Actividad y coeficiente de actividad. Coeficientes de actividad en las escalas de molalidad y molaridad. Disoluciones de electrolitos. Teoría de Debye-Hückel.
Equilibrios químicos en disolución.	Constante de equilibrio termodinámica en reacciones en disolución. Equilibrios ácido-base. Producto de solubilidad. Efectos salinos. Sistemas electroquímicos. Células galvánicas y electrolíticas. Medida de la fuerza electromotriz de una célula galvánica. Ecuación de Nernst. Potencial de electrodo.
Termodinámica de superficies.	Superficies e interfases. Tensión superficial. Fenómenos derivados de la tensión superficial. Adsorción. Fisisorción y quimisorción. Isotermas.

### Planificación

	Horas en clase	Horas fuera de clase	Horas totales
Sesión magistral	27	35	62
Seminarios	13	46	59
Resolución de problemas y/o ejercicios	0	14	14
Pruebas de autoevaluación	0	10	10
Pruebas de respuesta corta	2	0	2
Pruebas de respuesta larga, de desarrollo	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	Consistirán en la exposición breve por parte del profesor de los aspectos fundamentales de cada tema, tomando como base el material disponible en la plataforma TEMA. También se plantearán problemas numéricos que ayuden a comprender y asentar conceptos.
Seminarios	Las clases de seminario se dedicarán a la resolución de problemas y se profundizará sobre los aspectos que presenten mayores dificultades a los alumnos. Estas clases serán principalmente labor del alumno, bajo la supervisión del profesor.

### Atención personalizada

Pruebas	Descripción
Pruebas de autoevaluación	
Resolución de problemas y/o ejercicios	

### Evaluación

	Descripción	Calificación
Resolución de problemas y/o ejercicios	Problemas propuestos para cada tema de la asignatura.	Hasta un 15
Pruebas de autoevaluación	Pruebas tipo test en la plataforma TEMA.	Hasta un 15
Pruebas de respuesta corta	Pruebas escritas cortas sobre ciertas partes de la materia.	Hasta un 20
Pruebas de respuesta larga, de desarrollo	Exámen escrito sobre toda la materia de la asignatura.	Mínimo un 65

### Otros comentarios sobre la Evaluación

- El trabajo voluntario del alumno (tests autoevaluables + problemas propuestos) podrán constituir hasta el 15% de la calificación final siempre que el alumno realice, al menos, la mitad de las actividades que se propongan a lo largo del curso.
- Se realizarán dos pruebas escritas cortas (alrededor de una hora de duración) sobre ciertas partes de la materia. Estas pruebas no eliminan materia para la prueba final de la materia. La realización de ambas pruebas cortas es la condición mínima para que la materia sea calificada en acta. Estas pruebas cortas podrán suponer hasta un 20% de la calificación final, siempre que se obtengan 5 puntos sobre 10 en cada una de las pruebas.
- Se realizará una prueba escrita global al final de cuatrimestre (alrededor de tres horas de duración) sobre la totalidad de los contenidos de la materia. Esta prueba global supondrá al menos un 65% de la calificación final.

**IMPORTANTE:** Para superar la materia en acta es requisito imprescindible alcanzar en la prueba global una nota mínima de 4 puntos sobre 10.

- En las siguientes convocatorias de la asignatura se respetarán los porcentajes anteriores y se mantendrán las calificaciones obtenidas en el trabajo voluntario y en las pruebas cortas realizadas durante el curso, excepto en el caso de cambio de profesor, quién será el que establezca nuevas normas.

---

### **Fuentes de información**

Levine, **Fisicoquímica**, McGraw-Hill. 5ª Ed,

Atkins, **Química Física**, Panamerica, 8ª Ed,

Engel, **Química Física**, Pearson,

Chang, **Fisicoquímica**, McGraw-Hill,

---

### **Recomendaciones**

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

Química física II/V11G200V01403

---

#### **Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente**

Matemáticas: Matemáticas II/V11G200V01203

Química: Química I/V11G200V01105

Química: Química II/V11G200V01204



**DATOS IDENTIFICATIVOS****Química orgánica I**

Asignatura	Química orgánica I			
Código	V11G200V01304			
Titulación	Grao en Química			
Descriptor	Creditos ECTS	Selección	Curso	Cuatrimestre
	9	OB	2	1c
Lengua	Galego			
Impartición	Inglés			
Departamento	Química orgánica			
Coordinador/a	Iglesias Randulfe, Maria Teresa			
Profesorado	Cid Fernandez, Maria Magdalena Fall Diop, Yagamare Gomez Pacios, Maria Generosa Iglesias Antelo, Maria Beatriz Iglesias Randulfe, Maria Teresa			
Correo-e	iglesias@uvigo.es			
Web				
Descripción general	Nesta materia preténdese dar ao alumno unha formación sobre os principios fundamentais nos que se basea a Química Orgánica facendo referencia á estrutura e reactividade dos compostos orgánicos. Logo de dous temas xerais comezase polo estudo detallado da reactividade dos grupos funcionais con enlace múltiple carbono-osíxeno e carbono-carbono, incluíndo os compostos aromáticos.			

**Competencias de titulación**

Código	
A2	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: tipos de reacción química e as súas principais características asociadas
A10	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: propiedades dos compostos alifáticos, aromáticos, heterocíclicos e organometálicos
A11	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: natureza e comportamento dos grupos funcionais en moléculas orgánicas
A12	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: trazos estruturais dos elementos químicos e os seus compostos, incluíndo a estereoquímica
A13	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: principais rutas de síntese en Química Orgánica, incluíndo as interconversións de grupos funcionais e a formación dos enlaces carbono-carbono e carbono-heteroátomo
A19	Aplicar os coñecementos e a comprensión á resolución de problemas cuantitativos e cualitativos de natureza básica
A20	Avaliar, interpretar e sintetizar datos e información química
A21	Recoñecer e implementar boas prácticas científicas de medida e experimentación
A23	Presentar material e argumentos científicos de xeito oral e escrita a unha audiencia especializada
A25	Manexar con seguridade substancias químicas, considerando as súas propiedades físicas e químicas, incluíndo a valoración de calquera risco específico asociado co seu uso
A26	Realizar procedementos habituais de laboratorio e utilizar a instrumentación en traballos sintéticos e analíticos
A27	Monitorizar, mediante observación e medida de propiedades físicas e químicas, acontecementos ou cambios e documentalos e rexistralos de xeito sistemático e fiable
A28	Interpretar datos derivados das observacións e medicións do laboratorio en termos do seu significado e relacionalos coa teoría adecuada
B1	Comunicarse de forma oral e escrita en polo menos unha das linguas oficiais da Universidade
B3	Aprender de forma autónoma
B4	Procurar e administrar información procedente de distintas fontes
B5	Utilizar as tecnoloxías da información e das comunicacións e manexar ferramentas informáticas básicas
B7	Aplicar os coñecementos teóricos á práctica
B8	Traballar en equipo
B9	Traballar de forma autónoma
B12	Planificar e administrar adecuadamente o tempo
B13	Tomar decisións
B14	Analizar e sintetizar información e obter conclusións
B15	Avaliar de modo crítico e construtivo o entorno e a si mesmo

**Competencias de materia**

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

Distinguir as reaccións máis habituais en Química Orgánica. Relacionar o perfil enerxético cunha reacción determinada. Diferenciar os tipos de reactivos. Diferenciar os tipos de intermedios de reacción.	A2 A19	B1 B3 B4 B7 B8 B9 B12 B14
Establecer a influencia da estrutura e as características químicas dos grupos funcionais presentes nunha molécula na súa reactividade.	A2 A11	B1 B3 B4 B7 B8 B9 B12 B14
Explicar a reactividade dos compostos carbonílicos mediante un mecanismo de adición nucleófila e dos ácidos carboxílicos e os seus derivados mediante un mecanismo de adición-eliminación	A2 A10 A11 A13	B1 B3 B4 B7 B8 B9 B12 B14
Explicar a reactividade de compostos orgánicos con enlaces múltiples carbono-carbono mediante un mecanismo de adición electrófila.	A2 A10 A11 A13	B1 B3 B4 B7 B8 B9 B12 B14
Explicar a reactividade dos compostos aromáticos a través dun mecanismo de substitución electrófila.	A2 A10 A11 A13	B1 B3 B4 B7 B8 B9 B12 B14
Describir detalladamente para cada transformación o mecanismo de reacción adecuado, indicando etapas de reacción, estados de transición, intermedios etc.	A2 A11	B1 B3 B4 B7 B8 B9 B12 B14
Predicir o resultado da reacción dun substrato concreto cun reactivo dado nunhas condicións determinadas, no concenrente á rexioselectividade e estereoselectividade da reacción.	A11 A12 A13 A19	B1 B3 B4 B7 B8 B9 B12 B14
Aplicar as normas de seguridade e hixiene no traballo de laboratorio e levar a cabo o tratamento e a eliminación correcta dos residuos xerados.	A25	B1 B3 B4 B7 B8 B9 B12 B13 B14 B15

Realizar correctamente os procedementos experimentais habituais en preparaci3ns org3nicas sinxelas.	A21 A26	B1 B3 B4 B7 B8 B9 B12 B13 B14
Levar a cabo a elaboraci3n do produto dunha reacci3n, as3 como o seu illamento e purificaci3n mediante t3cnicas habituais (extracci3n, destilaci3n, recristalizaci3n e cromatograf3a).	A21 A26 A27	B1 B3 B4 B7 B8 B9 B12 B13 B14
Redactar e describir de forma axeitada os experimentos realizados no caderno de laboratorio, de modo que sexan reproducibles.	A23 A27 A28	B1 B3 B4 B7 B8 B9 B12 B13 B14 B15
Buscar e seleccionar informaci3n sobre os temas estudados.	A20	B4 B5 B14 B15

## Contidos

### Tema

Tema 1. Reactividade dos compostos org3nicos	Tipos de reacci3ns org3nicas: adici3n, eliminaci3n, substituci3n, condensaci3n, transposici3n. Isomerizaci3n. Mecanismos de reacci3n: reacci3ns concertadas e por pasos. Perfil enerx3tico dunha reacci3n. Control cin3tico e control termodin3mico. Ruptura homol3tica e heterol3tica: reacci3ns radicalarias e i3nicas. Intermedios de reacci3n: radicais libres, carbocati3ns e carban3ns. Concepto de nucle3filo e electr3filo.
Tema 2. Estrutura e reactividade de grupos funcionais	Alcanos e cicloalcanos: estabilidade e tensi3n de anel. Estereoisomer3a configuracional. Alquenos, alquinos e hidrocarburos arom3ticos: reactividade de enlaces m3ltiples, conxugaci3n, resonancia, aromaticidade, acidez de alquinos. Compostos org3nicos que conte3nen hetero3tomos: nitr3xeno, os3xeno, hal3xenos, metais, xofre. Acidez e basicidade de aminas e alcois. Estructuras de resonancia. Tautomer3a ceto-en3lica.
Tema 3. Reacci3ns de adici3n nucle3fila a grupos carbonilo	Mecanismo xeral da adici3n nucle3fila. Adici3ns nucle3filas non reversibles: adici3n de compostos organomet3licos (alquinos, organol3ticos e magnesianos); adici3n de hidruro (reducci3n de compostos carbon3licos a alcois); adici3n de iluros de f3sforo (reacci3n de Wittig). Reacci3ns de adici3n reversible: adici3n de compostos osixenados (auga, alcois); adici3n de tiois; adici3n de compostos nitroxenados (aminas e outros compostos nitroxenados); adici3n de cianuro.
Tema 4. Reacci3ns de substituci3n nucle3fila sobre grupos carbonilo	Mecanismo xeral de adici3n-eliminaci3n. Caracter3sticas estruturais e reactividade relativa dos derivados de 3cido. Reacci3ns de hidr3lise. Reacci3ns de esterificaci3n e transesterificaci3n. Reacci3ns de amon3lise. Hidr3lise de nitrilos
Tema 5. Reacci3ns de adici3n a enlaces m3ltiples C-C	Hidroxenaci3n (calores de hidroxenaci3n e estabilidade de alquenos e dienos). Reacci3ns de adici3n electr3fila a alquenos: adici3n de HX, estrutura e estabilidade de carbocati3ns, rexioselectividade; reacci3ns de hidrataci3n, orientaci3n e estereoqu3mica; adici3n de X <sub>2</sub> ; reacci3ns de hidroxilaci3n. Reacci3ns de adici3n a alquinos. Reacci3ns de adici3n electr3fila a dienos conxugados. Reacci3ns de oxidaci3n.

Tema 6. Reaccións de substitución electrófila aromática	Mecanismo xeral da substitución electrófila aromática. Reaccións principais de substitución electrófila aromática: haloxenación, nitración, sulfonación, alquilación e acilación de Friedel-Crafts. Reaccións de substitución electrófila aromática en fenóis e aminas aromáticas. Reaccións de substitución electrófila aromática en sistemas aromáticos substituídos: orientación e reactividade.
Práctica 1	Revisión das normas de seguridade no laboratorio de Química Orgánica. Recoñecemento e manexo do material de laboratorio.
Práctica 2	Reducción dunha cetona
Práctica 3	Adición nucleófila ao grupo carbonilo. Reacción de Wittig.
Práctica 4	Esterificación- transesterificación. Preparación dun produto natural: salicilato de metilo (axente aromatizante)
Práctica 5	Extracción dun éster natural (trimiristina) e hidrólise básica do mesmo
Práctica 6	Síntese por pasos: preparación da benzocaína a partir da para-toluidina.
Práctica 7	Adición electrófila a un dobre enlace carbono-carbono
Práctica 8	Substitución electrófila aromática: alquilación de Friedel-Crafts e nitración aromática

### Planificación

	Horas en clase	Horas fuera de clase	Horas totales
Sesión maxistral	14	41	55
Resolución de problemas e/ou exercicios	26	49	75
Traballos tutelados	3	17	20
Prácticas de laboratorio	45	5	50
Probas de resposta curta	2	6	8
Probas de resposta longa, de desenvolvemento	3	8	11
Probas prácticas, de execución de tarefas reais e/ou simuladas.	4	2	6

\*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 parte do profesor dos aspectos xerais do programa de forma estruturada, facendo especial énfase nos fundamentos e aspectos máis importantes ou de difícil comprensión para o alumno. O profesor facilitará , a través da plataforma tem@, o material necesario para a realización do traballo da semana seguinte. O alumno deberá traballar previamente o material entregado polo profesor e consultar a bibliografía recomendada para completar a información, co fin de seguir as explicacións dos contidos do programa con maior aproveitamento. Ao remate de cada tema o alumno deberá entregar cuberto un cuestionario con preguntas relativas ao mesmo
Resolución de problemas e/ou exercicios	Cada semana dedicaránse dúas horas a discutir os aspectos máis complicados do tema tratado, a resolver cuestións xurdidas no desenvolvemento dos temas e a resolución por parte do alumnado dos exercicios propostos nos boletíns
Traballos tutelados	O estudante, de maneira individual ou en grupo, elabora un documento sobre a temática da materia ou prepara seminarios, investigacións, memorias, ensaios, resumos de lecturas, conferencias, etc. Xeralmente trátase dunha actividade autónoma do/s estudante/s que inclúe a procura e recollida de información, lectura e manexo de bibliografía, redacción...
Prácticas de laboratorio	Realizaranse experimentos de laboratorio de xeito individual, en sesións de 3,5 h. cada unha. O alumno disporá dos guións das prácticas así como de material de apoio na plataforma tem@ co fin de que poida ter coñecemento previo dos experimentos a realizar. Ao inicio de cada sesión o profesor fará unha exposición dos contidos a desenvolver polos alumnos. Durante a realización das prácticas o alumno elaborará un caderno de laboratorio no que deberá anotar todas as observacións relativas ao experimento realizado

### Atención personalizada

Metodoloxías	Descrición
Resolución de problemas e/ou exercicios	Tempo dedicado polo profesorado a atender as necesidades e consultas do alumnado relacionadas co estudo e/ou temas vinculados coa materia e coas actividades desenvolvidas. O profesorado informará sobre o horario dispoñible na presentación da materia
Traballos tutelados	Tempo dedicado polo profesorado a atender as necesidades e consultas do alumnado relacionadas co estudo e/ou temas vinculados coa materia e coas actividades desenvolvidas. O profesorado informará sobre o horario dispoñible na presentación da materia

### Avaliación

	Descrición	Calificación
Resolución de problemas e/ou exercicios	<p>Valorarase a asistencia e participación nas clases de aula, a resolución por parte do alumno dunha serie de problemas e/ou exercicios propostos nun tempo/condicións establecidas polo profesor así como a realización de traballos sobre temas concretos propostos polo profesor.</p> <p>A cualificación neste apartado só será considerada se o estudante participa alomenos na metade destas actividades e acada alomenos o 50% da puntuación máxima para este apartado</p>	15
Traballos tutelados	<p>Valoración do resultado obtido na elaboración dun documento ou presentación sobre a temática da materia, na preparación de seminarios, investigacións, memorias, ensaios, resumos de lecturas, conferencias, etc.</p> <p>A participación neste apartado será obrigatoria e a cualificación só será considerada se o estudante acada alomenos o 50% da puntuación máxima para este apartado</p>	10
Prácticas de laboratorio	<p>A asistencia ás clases prácticas é obrigatoria</p> <p>O alumno para superar a materia deberá acadar alomenos o 50% da puntuación máxima posible para este apartado.</p> <p>Valorarase o seguinte:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Seguimento do traballo experimental realizado polo alumno nas sesións de laboratorio (12%)</li> <li>- Proba práctica (na que tamén figurarán cuestións teóricas sobre a práctica realizada no exame) que permitirá avaliar as competencias e destrezas adquiridas polo alumno. Dita proba realizarase de xeito independente para cada grupo de prácticas e terá lugar ao remate das sesións de laboratorio (12%).</li> <li>- Elaboración honesta, clara e precisa do caderno de laboratorio (6%)</li> </ul>	30
Probas de resposta curta	Realizaranse dúas probas breves, unha ao rematar o tema 2 e outra o tema 4, que abarcarán o temario explicado	20
Probas de resposta longa, de desenvolvemento	<p>Unha proba global para a avaliación das competencias adquiridas na materia, realizarase tras a impartición da mesma.</p> <p>Para a superación da materia o alumno deberá acadar un mínimo dun 50% na totalidade das probas escritas (probas de resposta curta e probas de resposta longa).</p> <p>A cualificación final será a suma de todos os apartados sempre que se superen os mínimos esixidos. De non ser o caso, a cualificación que figurará na acta será a da proba global de fin de cuatrimestre ponderada</p>	25

### Otros comentarios sobre la Evaluación

A participación do estudante nalgún dos actos de avaliación da materia implicará a condición de "presentado/a" e, polo tanto, a asignación dunha cualificación. Considéranse actos de avaliación a asistencia ás clases prácticas de laboratorio (tres ou máis), a realización de probas, a realización dos traballos tutelados e a entrega dun mínimo do 25% dos traballos ou exercicios encargados polo profesor.

#### Avaliación da convocatoria de xullo

Os alumnos que non superen a materia na convocatoria de fin de cuatrimestre só poderán recuperar os seguintes apartados na convocatoria de xullo:

**a) Resolución de problemas e/ou exercicios (máx. 1,5 puntos):** Unha vez rematado o proceso de avaliación de fin de cuatrimestre, o profesorado propondrá aos alumnos que non superen a materia a realización de boletíns de exercicios que lles permitan acadar as competencias das que serán avaliados na convocatoria de xullo. Este traballo terá que ser entregado antes do exame oficial desta convocatoria.

Esta cualificación substituirá á acadada durante o período lectivo neste apartado.

**b) Probas escritas (de resposta curta e longa) (máximo 4,5 puntos):** Os alumnos farán unha proba escrita na que se avaliarán as competencias adquiridas na materia. Para superar a materia o alumno deberá acadar alomenos o 50% da puntuación máxima para este apartado.

Esta cualificación substituirá a acadada no conxunto das probas escritas durante o período lectivo.

O resto das cualificacións (prácticas de laboratorio e traballos tutelados) serán os obtidos na avaliación de fin de cuatrimestre.

A cualificación final será a suma de todos os apartados sempre que se superen os mínimos esixidos. De non ser o caso, a cualificación que figurará na acta será a da proba escrita ponderada.

---

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

VOLLHARDT, K.P.C. e SCHORE, N.E, **Química Orgánica**, 5ª edición en castelán,

WADE, L.G., Jr, **Química Orgánica**, 7ª edición en castelán,

YURKANIS BRUCE, P, **Química Orgánica**, 5ª edición en castelán,

### **Bibliografía complementaria**

- EGE, S. "*Organic Chemistry: Structure and reactivity*", 5ª edición, Houghton Mifflin Company, Boston (2004)

- CAREY, F. "*Química Orgánica*", 6ª edición en castelán, McGraw-Hill Interamericana, 2006.

- CLAYDEN, J. GREEVES, N. WARREN, S. e WOTHERS, P. "*Organic Chemistry*", Oxford University Press, 2001.

- PALLEROS, D.R. "*Experimental Organic Chemistry*", John Wiley and Sons, 2000.

- QUIÑOÁ, E. e RIGUERA, R. "*Cuestiones y ejercicios de Química Orgánica*", 2ª edición, McGraw-Hill Interamericana, Madrid (2004).

- QUIÑOÁ, E. e RIGUERA, R. "*Nomenclatura y representación de los compuestos orgánicos*", 2ª edición, McGraw-Hill Interamericana, Madrid (2005).

---

### **Recomendacións**

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

Física III/V11G200V01301

Química analítica I/V11G200V01302

Química física I/V11G200V01303

#### **Asignaturas que se recomenda haber cursado previamente**

Biología: Biología/V11G200V01101

Química, física e biología: Laboratorio integrado I/V11G200V01103

Química, física e xeoloxía: Laboratorio integrado II/V11G200V01202

Química: Química I/V11G200V01105

Química: Química II/V11G200V01204

#### **Otros comentarios**

Materias que continúan o temario:

Química Orgánica II e Química Orgánica III

**DATOS IDENTIFICATIVOS****Herramientas informáticas y de comunicación en química**

Asignatura	Herramientas informáticas y de comunicación en química			
Código	V11G200V01401			
Titulación	Grado en Química			
Descriptores	Creditos ECTS	Seleccione	Curso	Cuatrimestre
	6	OB	2	2c
Lengua Impartición	Inglés			
Departamento	Química física Química orgánica			
Coordinador/a	Pérez Lorenzo, Moisés			
Profesorado	Pérez Lorenzo, Moisés Vaz Araújo, Belén			
Correo-e	moisespl@uvigo.es			
Web				
Descripción general				

**Competencias de titulación**

Código	
A20	Evaluar, interpretar y sintetizar datos e información química
A29	(*)Demostrar habilidades para os cálculos numéricos e a interpretación dos datos experimentais, con especial énfase na precisión e a exactitude
B2	Comunicarse a nivel básico en inglés en el ámbito de la Química
B4	Buscar y gestionar información procedente de distintas fuentes
B5	Utilizar las tecnologías de la información y de las comunicaciones y manejar herramientas informáticas básicas
B6	Manejar las matemáticas, incluyendo aspectos tales como análisis de errores, estimaciones de órdenes de magnitud, uso correcto de unidades y modos de presentación de datos
B7	Aplicar los conocimientos teóricos a la práctica
B9	Trabajar de forma autónoma
B10	Trabajar en un contexto tanto nacional como internacional
B14	Analizar y sintetizar información y obtener conclusiones
B15	Evaluar de modo crítico y constructivo su entorno y a sí mismo

**Competencias de materia**

Resultados previstos en la materia	Resultados de Formación y Aprendizaje	
(*)To know the different sources of scientific and technical information	A20	B2 B4 B5 B9 B14
(*)To understand the basics of running a science library and know how to perform an advanced use of its services		B2 B4 B5 B9 B14
(*)To classify scientific journals based on their theme or objective	A20	B2 B5 B9 B10 B15
(*)To know the basic characteristics of other sources: technical reports, conference proceedings, patents, dissertations, government publications, standards, videos, dictionaries, encyclopedias, directories, databases and "handbooks".	A20	B2 B5 B10
(*)To know the basic characteristics of other sources: technical reports, conference proceedings, patents, dissertations, government publications, standards, videos, dictionaries, encyclopedias, directories, databases and "handbooks".	A20	B2 B5 B10
(*)To know the structure and function of an abstracting or indexing service	A20	B2 B5 B10

(*)To know how to use statistical program packages to perform data fitting, graphical and other kinds of statistical analysis	A29	B5 B6 B7 B9 B14
---	-----	-----------------------------

## Contenidos

Tema	
(*)The scientific literature: sources of information	(*)Structure and classification of the literature. General rules of a literature search Function, organization and use of a scientific library
(*)Information Sources	(*)Books Journals Technical reports Conference Proceedings Patents Thesis Government Publications Standards Videos Dictionaries Directories Encyclopaedias Databases
(*)Using Internet	(*)Basic services offered by the Internet Remote connection and file transfer Search engines Electronic lists and subscription services Other services. Structure, function and design of web pages
(*)Indexing and abstracting services	(*)Identification of a scientific paper The ISI Web of Knowledge (WOK) The Chemical Abstract Service (CAS) and the Scifinder. Other abstracting services Handbooks
(*)Bibliographic Managers	(*)Classification References Use of popular software packages: Refworks and Endnote as examples.
(*)Preparation of a scientific, technical or academic document	(*)Parts of a scientific document References, tables and figures : general principles. Use of computer templates.
(*)Using Statistical Software	(*)2 and 3D graphics Statistical Analysis Data fitting

## Planificación

	Horas en clase	Horas fuera de clase	Horas totales
Sesión magistral	14	28	42
Prácticas en aulas de informática	26	52	78
Resolución de problemas y/o ejercicios	2	22	24
Pruebas de respuesta larga, de desarrollo	1.5	4.5	6

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

## Metodologías

	Descripción
Sesión magistral	(*)Explicación dos contidos correspondentes ao tema.
Prácticas en aulas de informática	(*)Prácticas consistentes en: realización de búsquedas bibliográficas, uso de gestores bibliográficos, uso de paquetes estadísticos.
Resolución de problemas y/o ejercicios	(*)Aplicación dos coñecementos adquiridos nas prácticas realizadas.

## Atención personalizada

Metodologías	Descripción
Prácticas en aulas de informática	
Resolución de problemas y/o ejercicios	



<b>Evaluación</b>		
	Descripción	Calificación
Prácticas en aulas de informática	(*)Aplicación práctica dos conceptos aprendidos nas sesións maxistrals.	20
Resolución de problemas y/o ejercicios	(*)Posta en práctica dos coñecementos adquiridos mediante a resolución de exercicios.	40
Pruebas de respuesta larga, de desarrollo	(*)Proba escrita	40

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

### **Fuentes de información**

Douville, J.A., **The literature of chemistry**, 1st,

Kaplan, S.M., **The English-Spanish Spanish-English dictionary of chemistry**, 1st,

Maizell, R.E., **How to find chemical information: a guide for practising chemists, educators and students**, 3d,

Day, R.A.; Gastel, B., **How to write and publish a scientific paper**, 6th,

### **Recomendaciones**

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

Química física II/V11G200V01403

#### **Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente**

Física III/V11G200V01301

Química física I/V11G200V01303

**DATOS IDENTIFICATIVOS****Métodos numéricos en química**

Asignatura	Métodos numéricos en química			
Código	V11G200V01402			
Titulación	Grao en Química			
Descriptor	Creditos ECTS	Selección	Curso	Cuatrimestre
	6	OB	2	2c
Lengua Impartición				
Departamento	Matemáticas Química analítica e alimentaria Química física			
Coordinador/a	Besada Morais, Manuel			
Profesorado	Besada Morais, Manuel Estevez Valcarcel, Carlos Manuel Leao Martins, Jose Manuel			
Correo-e	mbesada@uvigo.es			
Web				
Descripción general	Esta materia é a versión práctica matemática de aplicación a datos observados e de solución numérica de numerosos problemas que teñen difícil, ou imposible, solución analítica. Permitirá ó alumno adquirir habilidades sobre o manexo de gran cantidade de información numérica e consolidar o manexo dunha calculadora científica de gran potencia.			

**Competencias de titulación**

Código	
A22	Procesar datos e realizar cálculo computacional relativo a información e datos químicos
A23	Presentar material e argumentos científicos de xeito oral e escrita a unha audiencia especializada
A29	Demostrar habilidades para os cálculos numéricos e a interpretación dos datos experimentais, con especial énfase na precisión e a exactitude
B1	Comunicarse de forma oral e escrita en polo menos unha das linguas oficiais da Universidade
B3	Aprender de forma autónoma
B4	Procurar e administrar información procedente de distintas fontes
B5	Utilizar as tecnoloxías da información e das comunicacións e manexar ferramentas informáticas básicas
B6	Manexar as matemáticas, incluíndo aspectos tales como análise de erros, estimacións de ordes de magnitude, uso correcto de unidades e modos de presentación de datos
B7	Aplicar os coñecementos teóricos á práctica
B8	Traballar en equipo
B9	Traballar de forma autónoma
B12	Planificar e administrar adecuadamente o tempo
B13	Tomar decisións
B14	Analizar e sintetizar información e obter conclusións
B15	Avaliar de modo crítico e construtivo o entorno e a si mesmo

**Competencias de materia**

Resultados previstos en la materia	Resultados de Formación y Aprendizaje	
Utilizar os paquetes numéricos e simbólicos de MATLAB.	A22	B5 B9
Controlar distintas bases de numeración e decatarse da existencia de erros cometidos nas aproximacións	A29	B6 B9
Buscar aproximacións de raíces de ecuacións dunha variable e sistemas de ecuacións.	A22 A29	B5 B6 B7
Utilizar polinomios que se axustan a varios puntos do plano.	A22 A29	B5 B6 B7
Derivar e integrar numericamente, relacionar estes conceptos numéricos e analíticos e entender o porque da súa necesidade.	A22 A29	B5 B6 B7
Manexar axustes de datos a distintos tipos de curvas de elección previa mediante paquetes informáticos.	A22 A29	B4 B5 B6 B14

Entender e resolver unha ecuación diferencial e a necesidade dos métodos numéricos.	A22 A29	B3 B5 B6 B7
Expresar con soltura, de forma oral e escrita, conceptos numéricos.	A23	B1 B3 B4 B5 B8 B12 B13 B14 B15

## Contidos

Tema	
Tema 1. Introducción a análise numérica.	Sistemas de numeración Necesidade dos métodos numéricos. Fontes e análise do error. Software disponible.
Tema 2. Aproximación de raíces de ecuacións dunha variable.	Condicionamento do cálculo de raíces. Métodos de separación de raíces- Método da bisección. Método de Newton-Raphson. Teorema do punto fixo.
Tema 3. Interpolación numérica.	O problema xeral de interpolación. Interpolación de Lagrange. Error de interpolación e elección óptima de nodos. Interpolación polinomial.
Tema 4. Axuste de curvas.	Axuste de datos. Rectas de regresión por mínimos cadrados. Aproximación de funcións por mínimos cadrados. Interpolación polinomial a trozos.
Tema 5. Derivación e integración numérica.	Esquemas de derivación numérica basados en interpolación. Fórmulas de derivación finitas. Error de derivación. Fórmulas de integración con interpolación polinómica. Error de integración. Fórmulas de cuadraturas.
Tema 6. Resolución numérica de sistemas de ecuacións.	Métodos directos de resolución de sistemas lineais: Gauss. Métodos iterativos clásicos. Métodos de descenso: Máximo descenso e gradiente conxugado. Resolución de sistemas non lineais.

## Planificación

	Horas en clase	Horas fuera de clase	Horas totales
Sesión maxistral	14	28	42
Prácticas en aulas de informática	26	52	78
Probas de tipo test	4	12	16
Resolución de problemas e/ou exercicios	2	8	10
Traballos e proxectos	0	4	4

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

## Metodoloxía docente

	Descrición
Sesión maxistral	Exposición das bases teóricas e orientación por parte do profesorado sobre os contidos da materia
Prácticas en aulas de informática	Desenvolvemento nas aulas de informática dos exercicios que se propoñan nas aulas teóricas utilizando a calculadora científica MATLAB.

## Atención personalizada

Metodoloxías	Descrición
Prácticas en aulas de informática	Cada estudante demandará ó profesorado as aclaracións que estime oportunas para mellorar a comprensión da materia e desenvolver con éxito as tarefas que lle foron propostas. Estas consultas atenderanse no horario de titorías ou mediante petición previa.

## Avaliación

	Descrición	Calificación
Prácticas en aulas de informática	Ó final das sesións nas aulas de informática, o alumno resolverá algúns exercicios do mesmo tipo que os dos realizados na aula.	25
Probas de tipo test	Durante o curso realizaranse alomenos tres probas parciais curtas tipo test e tipo práctico que contarán un 25 por cen na cualificación final. Ademais, nunha proba final, realizarase outra proba tipo test de tódala materia que contabilizará outro 10 por cen na cualificación final.	35
Resolución de problemas e/ou exercicios	Ó finalizar o curso realizarase unha proba práctica resolvendo algúns exercicios prácticos na aula de informática	30

---

### Otros comentarios sobre la Evaluación

---

Os alumnos que non superen a materia na convocatoria ordinaria e pretendan facelo na convocatoria extraordinaria, manterán as cualificacións obtidas durante o curso en cada un dos apartados anteriores, salvo as cualificacións das probas prácticas de informática e as dúas probas realizadas a final de curso que serán avaliadas no exame correspondente. Neste caso, o alumno ten que poñerse en contacto co profesor con suficiente antelación.

A participación do estudante nalgún dos actos de avaliación da materia implicará a condición de "presentado" e, polo tanto, a asignación dunha cualificación. Considéranse actos de avaliación a asistencia ás prácticas de informática (tres ou mais), a realización de probas ou a entrega dun mínimo do 25% dos problemas ou exercicios encargados polo profesor.

---

---

### Bibliografía. Fontes de información

---

Chapra, S.C.; Canale, R.P., **Métodos numéricos para ingenieros**, 2010,

Besada, M., **MATLAB: todo un mundo**, 2007,

Mathews, J.H.; Fink, K.D., **Métodos numéricos con MATLAB**, 2000,

Nakamura, S., **Análisis numérico y visualización gráfica con MATLAB**, 1997,

---

---

### Recomendacións

---

#### Asignaturas que se recomenda haber cursado previamente

---

Matemáticas: Matemáticas I/V11G200V01104

Matemáticas: Matemáticas II/V11G200V01203

---

**DATOS IDENTIFICATIVOS****Química física II**

Asignatura	Química física II			
Código	V11G200V01403			
Titulación	Grao en Química			
Descriptor	Creditos ECTS	Selección	Curso	Cuatrimestre
	9	OB	2	2c
Lengua	Castelán			
Impartición	Galego			
Departamento	Química física			
Coordinador/a	Fernandez Novoa, Alejandro			
Profesorado	Estevez Valcarcel, Carlos Manuel Fernandez Novoa, Alejandro			
Correo-e	afnovo@uvigo.es			
Web				
Descripción general	Aplicación dos principios e métodos da Mecánica Cuántica ao estudo da estrutura molecular e a espectroscopia.			

**Competencias de titulación**

Código	
A3	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: principios da Mecánica Cuántica e a súa aplicación na descrición da estrutura e as propiedades de átomos e moléculas
A6	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: principios de Termodinámica e as súas aplicacións en Química
A8	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: principais técnicas de investigación estrutural, incluíndo a Espectroscopía
A19	Aplicar os coñecementos e a comprensión á resolución de problemas cuantitativos e cualitativos de natureza básica
A20	Avaliar, interpretar e sintetizar datos e información química
A21	Recoñecer e implementar boas prácticas científicas de medida e experimentación
A22	Procesar datos e realizar cálculo computacional relativo a información e datos químicos
A27	Monitorizar, mediante observación e medida de propiedades físicas e químicas, acontecementos ou cambios e documentalos e rexistralos de xeito sistemático e fiable
A28	Interpretar datos derivados das observacións e medicións do laboratorio en termos do seu significado e relacionalos coa teoría adecuada
A29	Demostrar habilidades para os cálculos numéricos e a interpretación dos datos experimentais, con especial énfase na precisión e a exactitude

**Competencias de materia**

Resultados previstos en la materia	Resultados de Formación y Aprendizaje
Formular hamiltonianos moleculares, utilizar sobre ellos la aproximación de Born-Oppenheimer y discutir sus consecuencias.	A3 A19
Manejar superficies y perfiles de energía potencial y los conceptos relativos a ellas.	A3
Aplicar los métodos OM y EV para la descripción del enlace químico en sistemas simples y conocer (con su origen) las limitaciones de estos métodos.	A19
Describir las técnicas de localización orbital y el fundamento de la hibridación de orbitales atómicos.	A3
Aplicar (conociendo fundamentos y limitaciones) los principales métodos de cálculo para el estudio de estructuras moleculares (HF, post-HF, DFT, ...).	A3 A19 A20 A22
Describir las formas de interacción radiación-materia y formular reglas de selección de dipolo eléctrico.	A8
Vincular la frecuencia de la radiación con el movimiento molecular responsable de una transición espectroscópica.	A8
Justificar el ensanchamiento de las líneas espectrales y el efecto del medio sobre los espectros.	A8
Interpretar espectros de rotación y vibración-rotación para obtener información estructural, haciendo uso de los modelos cuánticos simples (rotor rígido y elástico y osciladores armónico y anarmónico), reglas de selección y técnicas de asignación de líneas.	A3 A8 A19 A20 A22
Discutir el principio de Franck-Condon y sus consecuencias.	A3 A8

Interpretar espectros electrónicos, determinando información estructural a partir de ellos, y conocer sus fundamentos.	A3 A8 A19 A22
Describir los diferentes procesos de desactivación de estados electrónicos excitados.	A8 A19
Describir los fundamentos de las espectroscopias de resonancia magnética e interpretar el origen físico del desplazamiento químico y de los acoplamientos presentes en los espectros de RMN.	A8 A19 A22
Describir las peculiaridades instrumentales de las técnicas espectroscópicas en las diferentes regiones espectrales.	A8
Aplicar los conocimientos teóricos adquiridos en Química Física I para determinar experimentalmente constantes de equilibrio químico, coeficientes de actividad y magnitudes termoquímicas.	A6 A19 A20 A21 A27 A28 A29

## Contidos

Tema	
Estructura Electrónica das Moléculas Diatómicas.	- Aproximación de Born-Oppenheimer. - Método OM para a molécula H2+. - Métodos OM e EV para a molécula H2. - Método OM para moléculas diatómicas homo e heteronucleares.
Estructura Electrónica das Moléculas Poliatómicas.	- Método OM en moléculas poliatómicas. - Método de Hartree-Fock. Conxuntos base. - Outros métodos en Química Computacional.
Introducción á Espectroscopia Molecular.	- Interacción radiación-materia. Plantexamento xeral. - Integral momento dipolar de transición. Regras de selección. - Intensidade e forma das transicións espectrais.
Espectroscopia de Rotación.	- Espectros de rotación de moléculas diatómicas. Modelos do rotor ríxido e elástico. - Espectros de rotación de moléculas poliatómicas.
Espectroscopia de Vibración.	- Espectros de vibración de moléculas diatómicas. Modelos do oscilador harmónico e anharmónico. - Espectros de vibración-rotación de moléculas diatómicas. - Espectros de vibración de moléculas poliatómicas. - Espectroscopia Raman.
Espectroscopia Electrónica.	- Espectros electrónicos de moléculas diatómicas. - Estructura de vibración. Principio de Franck-Condon. - Estructura fina de rotación. - Espectros electrónicos de moléculas poliatómicas.
Espectroscopias de Resonancia.	- Introducción á resonancia magnética. - Desprazamento químico. - Interacción spin-spin. Constante de acoplamento. - Espectroscopia de resonancia de spin electrónico.
Prácticas de Termodinámica Química (seis sesións)	- Determinación de constantes de equilibrio empregando técnicas espectrofotométricas ou potenciométricas. - Determinación experimental de entalpías de combustión, disolución, neutralización ou vaporización. - Propiedades coligativas. - Determinación experimental de coeficientes de actividade empregando unha técnica potenciométrica.
Prácticas de Química Cuántica e Espectroscopia (sete sesións).	- Estudio teórico da estrutura molecular das moléculas H2 y H2+. - Estudio teórico da estrutura molecular de outras moléculas diatómicas. - Isomería conformacional e rotación interna no n-butano. - Predicción, interpretación teórica e resolución do espectro de vibración-rotación do HCl en fase gas. - Espectroscopia electrónica: Espectro da molécula de I2 en fase gas.

## Planificación

	Horas en clase	Horas fuera de clase	Horas totales
Sesión maxistral	27	54	81
Seminarios	13	37	50
Prácticas de laboratorio	45.5	4.5	50

Resolución de problemas e/ou exercicios de forma autónoma	0	10	10
Probas de resposta longa, de desenvolvemento	4	8	12
Informes/memorias de prácticas	0	9	9
Probas de resposta curta	2	4	6
Probas de tipo test	0	4	4
Probas prácticas, de execución de tarefas reais e/ou simuladas.	1	2	3

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

### Metodoloxía docente

	Descrición
Sesión maxistral	Consistirán na exposición dos aspectos fundamentais de cada tema por parte do profesor, tomando como base o material disponible na plataforma TEM@ (esquemas, boletíns de problemas,...). Aparte da exposición de temas, tamén se plantexarán problemas numéricos que axuden a comprender e asentarse os conceptos.
Seminarios	As clases de seminario serán principalmente labor do alumno, baixo a supervisión do profesor, e empregaranse fundamentalmente para: <ul style="list-style-type: none"> <li>- Resolución de problemas, tanto de xeito individual como en grupo.</li> <li>- Incidir, unha vez o alumno traballe os aspectos básicos, sobre aqueles contidos de cada tema que poidan presentar unha maior complexidade.</li> <li>- Propoñer problemas/traballos para a súa resolución na casa, tanto de forma individual como en grupo.</li> </ul>
Prácticas de laboratorio	Realización baixo a supervisión do profesor pero de xeito autónomo, de prácticas de laboratorio ou de química computacional. As devanditas prácticas realizaranse por parellas e en sesións de 3,5 horas. Coa antelación suficiente, os alumnos disporán na plataforma TEM@ dos guións das prácticas a realizar xunto con todo o material adicional necesario. O guión presentará os elementos esenciais para realizar a práctica a nivel experimental ou computacional, así como os puntos básicos do seu fundamento teórico e do tratamento dos datos Ó rematar as prácticas, e dentro do prazo que fixe o profesor, será necesario entregar o correspondente informe/memoria.
Resolución de problemas e/ou exercicios de forma autónoma	Para cada un dos temas, proporanse determinados "Problemas Avaliables" ou outros traballos que o alumno deberá resolver ou realizar para entregar ao profesor no prazo que se fixe.

### Atención personalizada

### Avaliación

	Descrición	Calificación
Prácticas de laboratorio	Puntúanse aquí xunto co esforzo e a actitude, as destrezas e as competencias desenvolvidas polo alumno durante a realización das distintas prácticas.  Este apartado supora como máximo 4,0 puntos da cualificación final máxima da parte experimental que será de 10 puntos.	ata 12,0
Resolución de problemas e/ou exercicios de forma autónoma	Para cada un dos temas, proporanse determinados "Problemas Avaliables" ou outros traballos que o alumno deberá resolver ou realizar. Estos problemas ou traballos no seu conxunto, suporán como máximo 1 punto da cualificación total final máxima da parte teórica que será de 10 puntos.	ata 7,0
Probas de resposta longa, de desenvolvemento	Realización dunha proba escrita global (3 horas de duración) ao final do cuadrimestre, na data fixada pola Xunta de Facultade, que suporá como máximo 6,0 puntos da cualificación total final máxima da parte teórica que será de 10 puntos.  Para superar a materia é necesario acadar neste exame unha cualificación mínima de 4,0 puntos sobre 10 puntos. No caso de non superar dita puntuación a cualificación que se reflectirá na acta será únicamente a cualificación deste exame, non contabilizándose ningún dos demais apartados.	ata 42
Informes/memorias de prácticas	Teranse en conta os aspectos formais relativos á organización, uso correcto das unidades, confección correcta das gráficas e exposición dos resultados. Valorarase tamén a análise crítica destes e a obtención de conclusións.  Este apartado supora como máximo 2,0 puntos da cualificación final máxima da parte experimental que será de 10 puntos.	ata 6,0

Probas de resposta curta	Realización ao longo do cuadrimestre de dúas probas curtas (1 hora de duración) de carácter non liberatorio.	ata 14
	Cada unha destas probas suporá como máximo 1 punto da cualificación total final máxima da parte teórica que será de 10 puntos.	
Probas de tipo test	Ó rematar cada tema o grupo de temas o alumno terá, a través de plataforma TEM@, a posibilidade de responder un "test de autoavaliación" autocorrixible.	ata 7,0
	Estos test no seu conxunto, suporán como máximo 1 punto da cualificación total final máxima da parte teórica que será de 10 puntos.	
Probas prácticas, de execución de tarefas reais e/ou simuladas.	Esta proba escrita realizarase na data fixada pola Xunta de Facultade e versará sobre os coñecementos e destrezas que o alumno debe ter adquirido durante o desenvolvemento das sesións de prácticas. As preguntas situaranse, nalgúns casos, no contexto dalgunhas das experiencias realizadas polo alumno e, noutros, terán un ámbito máis xeral. A través das devanditas preguntas avaliarase a súa capacidade para resolver os problemas presentados.	ata 12,0
	Este apartado supora como máximo 4,0 puntos da cualificación final máxima da parte experimental que será de 10 puntos.	

### Otros comentarios sobre la Evaluación

A avaliación do curso realizarase fundamentalmente dun xeito continuado tendo en conta os aspectos mencionados mais arriba, e distinguindo entre a parte teórica e a parte práctica da asignatura.

#### Parte Teórica:

A avaliación da **parte teórica** contribuirá, no seu conxunto (probas curtas (20%), proba longa (60%), resolución de problemas/traballos (10%), test de autoavaliación (10%)), un **70%** á cualificación final da materia. E **requisito imprescindible para superar a materia** obter na **proba longa** unha **cualificación mínima de 4,0 sobre 10,0 puntos**. No caso de non acadar dita puntuación a cualificación que se reflectirá na acta será únicamente a cualificación deste exame, non contabilizándose ningún dos demais apartados.

#### Parte Práctica:

A avaliación da **parte práctica** contribuirá, no seu conxunto (prácticas de laboratorio (40%), informes (20%) e examen (40%)), un **30%** á cualificación final da materia. E **requisito imprescindible para superar a materia** obter, na **parte práctica**, unha **cualificación mínima de 5,0 sobre 10 puntos**. No caso de non acadar dita puntuación a cualificación que se reflectirá na acta será unicamente a do 75% desta parte práctica (no caso de terse superada a cualificación mínima de 4,0 puntos na proba longa).

A asistencia ás sesións prácticas é obrigatoria e, polo tanto, non é posible aprobar a materia no caso de non terse realizado.

A realización das dúas probas curtas, ou da proba escrita de prácticas, ou da proba global ou a realización das prácticas de laboratorio, implicará a condición de presentado/a e, polo tanto, a asignación dunha cualificación.

#### Segunda Oportunidade:

Para a avaliación na segunda oportunidade, manteranse as cualificacións e as porcentaxes das probas curtas, dos problemas/traballos propostos, das prácticas de laboratorio e dos test de autoavaliación. No caso de ter unha cualificación igual ou superior a 5,0 puntos na proba global (longa) ou igual ou superior a 4,0 na proba escrita de prácticas, manterase dita cualificación (e a porcentaxe) e só será necesario realizar a outra.

Se o profesor o estima oportuno, tamén poderá ser necesaria a repetición do informe/memoria das prácticas.

### Bibliografía. Fontes de información

LEVINE, I. N., "Fisicoquímica" (vol. II), 5ª edición,

ENGEL, T.; REID, P., "Química Física", 1ª edición,

BERTRÁN, J.; BRACHANDELL, V.; MORENO, M.; SODUPE, M., "Química Cuántica", 2ª edición,

BERTRÁN RUSCA, J.; NÚÑEZ DELGADO, J., "Química Física" (vol. I), 1ª edición,

ATKINS P. W., DE PAULA J., "Química Física" (8ª Edición). Editorial Médica Panamericana. (2008).

LEVINE I.N., "Química Cuántica" (5ª ed.), Editorial Prencice Hall (2001).



- **BANWELL C.N., Mc CASH E., "Fundamentals of Molecular Spectroscopy", Editorial McGraw-Hill (1994).**
- **LABOWITZ L.C., ARENTS J.S., "Fisicoquímica: Problemas y Soluciones", Editorial AC (1974).**
- **FORESMAN J.B., FRISH A., "Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods: a guide to using Gaussian" (2ª ed.), Gaussian Inc (1996).**

---

## **Recomendaciones**

---

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

---

Ferramentas informáticas e de comunicación en química/V11G200V01401

Métodos numéricos en química/V11G200V01402

Química inorgánica I/V11G200V01404

---

### **Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente**

---

Matemáticas: Matemáticas I/V11G200V01104

Matemáticas: Matemáticas II/V11G200V01203

Física III/V11G200V01301

Química física I/V11G200V01303

---

**DATOS IDENTIFICATIVOS****Química inorgánica I**

Asignatura	Química inorgánica I			
Código	V11G200V01404			
Titulación	Grado en Química			
Descriptores	Creditos ECTS	Selección	Curso	Cuatrimestre
	9	OB	2	2c
Lengua	Castellano			
Impartición				
Departamento	Química inorgánica			
Coordinador/a	García Fontán, María Soledad			
Profesorado	Couce Fortunez, María Delfina García Fontán, María Soledad Perez Lourido, Paulo Antonio Rodríguez Arguelles, María Carmen Valencia Matarranz, Laura María			
Correo-e	sgarcia@uvigo.es			
Web				
Descripción general	(*)En esta asignatura se estudia la química de los elementos de los grupos principales y sus compuestos. Con ella se pretende dar una visión completa y sistemática de los diferentes tipos de comportamiento químico y de los compuestos existentes			

**Competencias de titulación**

Código	
A1	Demostrar conocimiento y comprensión de hechos esenciales, conceptos, principios y teorías en: aspectos principales de la terminología química, nomenclatura, conversiones y unidades.
A2	Demostrar conocimiento y comprensión de hechos esenciales, conceptos, principios y teorías en: tipos de reacción química y sus principales características asociadas
A9	Demostrar conocimiento y comprensión de hechos esenciales, conceptos, principios y teorías en: propiedades características de los elementos y sus compuestos, incluyendo las relaciones entre grupos y sus variaciones en la tabla periódica
A12	Demostrar conocimiento y comprensión de hechos esenciales, conceptos, principios y teorías en: rasgos estructurales de los elementos químicos y sus compuestos, incluyendo la estereoquímica
A14	Demostrar conocimiento y comprensión de hechos esenciales, conceptos, principios y teorías en: relación entre propiedades macroscópicas y propiedades de átomos y moléculas individuales, incluyendo las macromoléculas
A20	Evaluar, interpretar y sintetizar datos e información química
A25	Manejar con seguridad sustancias químicas, considerando sus propiedades físicas y químicas, incluyendo la valoración de cualquier riesgo específico asociado con su uso
A26	Realizar procedimientos habituales de laboratorio y utilizar la instrumentación en trabajo sintético y analítico
A27	Monitorizar, mediante observación y medida de propiedades físicas y químicas, sucesos o cambios y documentarlos y registrarlos de manera sistemática y fiable
A28	Interpretar datos derivados de las observaciones y mediciones del laboratorio en términos de su significado y relacionarlos con la teoría adecuada
B1	Comunicarse de forma oral y escrita en al menos una de las lenguas oficiales de la Universidad
B3	Aprender de forma autónoma
B4	Buscar y gestionar información procedente de distintas fuentes
B5	Utilizar las tecnologías de la información y de las comunicaciones y manejar herramientas informáticas básicas
B6	Manejar las matemáticas, incluyendo aspectos tales como análisis de errores, estimaciones de órdenes de magnitud, uso correcto de unidades y modos de presentación de datos
B7	Aplicar los conocimientos teóricos a la práctica
B8	Trabajar en equipo
B9	Trabajar de forma autónoma
B12	Planificar y gestionar adecuadamente el tiempo
B13	Tomar decisiones
B14	Analizar y sintetizar información y obtener conclusiones
B15	Evaluar de modo crítico y constructivo su entorno y a sí mismo

**Competencias de materia**

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

(*)Elegir el método general más adecuado para la obtención de los elementos de los grupos principales a partir de los sus compuestos presentes en la naturaleza.	A1 A2 A9	B1 B3 B4 B9
(*)Distinguir el diferente comportamiento químico de los elementos de los grupos principales dentro de cada grupo.	A1 A2 A9 A14	B1 B3 B4 B9
(*)Identificar en cada grupo de elementos de los grupos principales: tipos de compuestos y su reactividad.	A1 A2 A9 A12 A14	B1 B3 B4 B9
(*)Deducir las propiedades físicas de un compuesto a partir del tipo de enlace entre sus componentes y su estructura.	A9 A12 A14 A20	B1 B3 B4 B9
(*)Relacionar las propiedades físicas y químicas, de los elementos de los grupos principales y sus compuestos con sus aplicaciones.	A2 A9 A12 A14	B1 B3 B4 B9
(*)Llevar a cabo en el laboratorio la preparación y el estudio de algunas propiedades físicas y químicas de elementos de los grupos principales y de sus compuestos.	A25 A26 A27 A28	B4 B5 B6 B7 B8 B9 B12 B13 B14 B15

## Contenidos

Tema	
(*)1 El hidrógeno.	(*)El elemento. Átomos e iones de hidrógeno. Propiedades y reacciones del dihidrógeno. Compuestos de hidrógeno. El agua.
(*)Gases nobles	(*)Síntesis, estructura y reactividad de los fluoruros de xenón.
(*)3. Halógenos	(*)Propiedades y sus tendencias. Pseudohalógenos. Interhalógenos. Polihaluros. Óxidos, oxoácidos y oxoaniones. Fluorocarbonos.
(*)4. Los elementos del grupo 16	(*)Hidruros. Halogenuros. Óxidos metálicos. Óxidos, oxohaluros y oxoaniones de azufre. Sulfuros, seleniuros y telururos metálicos.
(*)5. Los elementos del grupo 15.	(*) Ciclo del nitrógeno. Nitruros, azidas, amoniacó, hidrazina e hidroxilamina. Haluros. Óxidos y química redox en medio acuoso del nitrógeno. Óxidos y oxoaniones de fósforo, arsénico, antimonio y bismuto. Fosfinas.
(*)6. Los elementos del grupo 14	(*)Compuestos simples de Carbono. Compuestos simples de silicio con oxígeno. Óxidos de germanio, estaño y plomo. Compuestos con nitrógeno. Compuestos organometálicos.
(*)7. Los elementos del grupo 13	(*)Compuestos simples del boro. Clústeres de boro. Síntesis y reactividad de boranos superiores y borohidruros. Metaloboranos y carbaboranos. Compuestos de aluminio y galio: Hidruros, halogenuros y óxidos. Oxoácidos. Química en disolución acuosa.
(*)9. Metales alcalinos.	(*)Compuestos simples. Hidróxidos. Oxosales. Disoluciones en amoniacó líquido. Compuestos de coordinación y organometálicos.
(*)10 Metales alcalinotérreos.	(*)Compuestos simples. Hidróxidos. Carburos. Oxosales. Compuestos organometálicos.
Práctica 1.	Estudio de las propiedades de los óxidos. Clasificación, obtención y reactividad.
Práctica 2.	Preparación de un alumbre
Práctica 3.	Reacciones y comportamiento químico de los halógenos.
Práctica 4.	Obtención de compuestos de azufre.
Práctica 5.	Combinaciones nitrógeno-hidrógeno: preparación de sulfato de hidracina
Práctica 6	Preparación de compuestos de boro
Práctica 7	Preparación de un alumbre de hierro: sal de Morh
Práctica 8.	Preparación de haluros metálicos anhidros: SnI4 y SnI4(PPh3)2
Práctica 9.	Preparación de gel de hidróxido de aluminio
(*)Práctica 11	(*)Preparación de sales de Bi(III)

**Planificación**

	Horas en clase	Horas fuera de clase	Horas totales
Sesión magistral	27	48	75
Resolución de problemas y/o ejercicios	13	37	50
Trabajos tutelados	2	17	19
Prácticas de laboratorio	45	5	50
Otros	2	4	6
Pruebas de respuesta corta	3	6	9
Pruebas de respuesta larga, de desarrollo	3	8	11
Pruebas prácticas, de ejecución de tareas reales y/o simuladas.	4	1	5

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

**Metodologías**

	Descripción
Sesión magistral	Exposición por parte del profesor del programa de la materia, haciendo especial énfasis en los fundamentos y aspectos más importantes o de difícil comprensión para el alumno. Para esto el profesor/a facilitará a través de la plataforma Tem@, el material necesario para el trabajo que se realizará la semana siguiente. Se recomienda al alumno/a que trabaje previamente el material entregado y consulte la bibliografía recomendada para completar la información, con el fin de seguir las explicaciones de los contenidos del programa con mayor aprovechamiento.
Resolución de problemas y/o ejercicios	Se dedicará una hora semanal para discutir y resolver cuestiones sobre el tema tratado. Los alumnos trabajarán en la resolución de los ejercicios propuestos en los boletines
Trabajos tutelados	El estudiante, de manera individual, o en grupo, elabora un documento sobre la temática de la materia o prepara seminarios, memorias, resúmenes de lecturas, etc. Se trata de una actividad para el desarrollo de las competencias transversales de la materia.
Prácticas de laboratorio	Los experimentos se realizarán de manera individual, en sesiones de 3,5 horas/semana. El alumno dispondrá de los guiones de prácticas así como el material de apoyo en la plataforma tem@ con el fin de pueda tener conocimiento previo de los experimentos a realizar. Al inicio de cada sesión el profesor hará una exposición de los contenidos a desarrollar por parte de los alumnos. Durante la realización de las prácticas el alumno elaborará un cuaderno de laboratorio en el que deberá anotar todas las observaciones relativas al experimento realizado.
Otros	Se realizarán dos pruebas cortas y una prueba final donde el alumno resolviera cuestiones relacionadas con todo el temario impartido.

**Atención personalizada**

Metodologías	Descripción
Trabajos tutelados	
Resolución de problemas y/o ejercicios	
Otros	

**Evaluación**

	Descripción	Calificación
Resolución de problemas y/o ejercicios	Se valorará la resolución por parte del alumno de una serie de problemas y/o ejercicios propuestos en el tiempo/condiciones establecido/as por el profesor. La puntuación será considerada si en la prueba larga se alcanza un calificación igual o superior a 5 puntos sobre 10	10
Trabajos tutelados	Valoración del resultado obtenido en la elaboración de un documento o presentación sobre la temática de la materia, en la preparación de seminarios, resúmenes de lecturas, etc. La puntuación será considerada si en la prueba larga se alcanza un calificación igual o superior a 5 puntos sobre 10	5

Es obligatoria la asistencia a las sesiones de laboratorio.  
 El profesor realizará un seguimiento del trabajo experimental realizado por el alumno en las sesiones de laboratorio, así como del cuaderno elaborado (20%).  
 Se realizará una prueba teórica o práctica (una sesión de laboratorio) que permitirá evaluar las competencias y destrezas adquiridas por el alumno. Dicha prueba será realizada de forma independiente para cada grupo de prácticas (10%).  
 La puntuación será considerada si en la prueba larga se alcanza una calificación igual o superior a 5 puntos sobre 10

Pruebas de respuesta corta	Pruebas breves sobre aspectos concretos de los contenidos explicados en clase. La puntuación será considerada si en la prueba larga se alcanza una calificación igual o superior a 5 puntos sobre 10	25
Pruebas de respuesta larga, de desarrollo	Prueba final para evaluación de las competencias adquiridas en la asignatura a desarrollar tras la impartición de la misma. El valor máximo de misma será por lo tanto de un 30% y será de carácter obligatorio.	30

### Otros comentarios sobre la Evaluación

#### Fuentes de información

SHRIVER, ATKINS, **Química Inorgánica**, 4.<sup>a</sup> edición en español,  
 HOUSECROFT, C. E. ; A. G. SHARPE., **Química Inorgánica**, 2.<sup>a</sup> edición en español,  
 RAYNER-CANHAM, G., **Química Inorgánica Descriptiva**, 2.<sup>a</sup> edición,  
 SHRIVER, ATKINS, **Inorganic Chemistry**, Fifth Edition,

### Recomendaciones

#### Asignaturas que se recomienda cursar simultáneamente

Herramientas informáticas y de comunicación en química/V11G200V01401  
 Métodos numéricos en química/V11G200V01402  
 Química física II/V11G200V01403

#### Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente

Química, física y biología: Laboratorio integrado I/V11G200V01103  
 Química, física y geología: Laboratorio integrado II/V11G200V01202  
 Química: Química I/V11G200V01105  
 Química: Química II/V11G200V01204