



## Facultad de Química

### Presentación

Los estudios para ejercer la profesión de químico tienen amplia tradición en la Universidad de Vigo. Desde los primeros albores de los campus universitarios de Vigo y Ourense, hace más de 30 años, la docencia de la Química tuvo un papel relevante con la oferta del primero ciclo de la Licenciatura. La reordenación del Sistema Universitario de Galicia en los años 90 y el actual proceso de implantación del Espacio Europeo de Educación Superior (EEES) modificaron formalmente la oferta de titulaciones, pero no el espíritu pionero de los químicos en la búsqueda de un mejor servicio a la sociedad.



### Titulaciones impartidas en el centro

- Grado en Química
- Másteres y Doctorados:
  - Investigación Química y Química Industrial (Interuniversitario)
  - Química Teórica y Modelización Computacional (Interuniversitario)
- Máster profesionalizante:
  - Ciencia y Tecnología de Conservación de Productos de la Pesca

### Servicios del centro

El Decanato de la Facultad de Química está situado en el primer piso del bloque E y la Delegación de Alumnos de Química está situada en la planta baja del incluso bloque.

La Facultad dispone de Aula de Informática y dos Aulas de Videoconferencia, situadas en el bloque E, planta baja.

Además, el edificio de Ciencias Experimentales cuenta con los siguientes servicios centralizados para los alumnos de las tres facultades que alberga:

- Secretaría de alumnos y conserjería (pabellón de servicios centrales)
- Cafetería y comedor
- Reprografía (pabellón E)
- Biblioteca (Edificio anexo)

### Página web

Toda la información sobre la Facultad de Química y los títulos que se imparten se encuentra en el enlace:

<http://quimica.uvigo.es>

## 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

<b>DATOS IDENTIFICATIVOS</b>				
<b>Física III</b>				
Asignatura	Física III			
Código	V11G200V01301			
Titulación	Grado en Química			
Descriptores	Creditos ECTS	Seleccione	Curso	Cuatrimestre
	6	OB	2	1c
Lengua Impartición				
Departamento	Física aplicada Química Física			
Coordinador/a	Flores Rodríguez, Jesús Ramón			
Profesorado	Flores Rodríguez, Jesús Ramón Martínez Piñeiro, Manuel			
Correo-e	flores@uvigo.es			
Web				
Descripción general	La materia pretende ser una introducción a la Mecánica Cuántica y a la Mecánica Estadística, orientada a sus aplicaciones en Química.			

<b>Competencias</b>	
Código	
C3	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
C14	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
C19	Aplicar dicho conocimiento y comprensión a la resolución de problemas cuantitativos y cualitativos de naturaleza básica
C20	Evaluar, interpretar y sintetizar datos e información química
C22	Procesar datos y realizar cálculo computacional relativo a información y datos químicos
C23	Presentar material y argumentos científicos de manera oral y escrita a una audiencia especializada
D1	Comunicarse de forma oral y escrita en al menos una de las lenguas oficiales de la Universidad
D3	Aprender de forma autónoma
D4	Buscar y gestionar información procedente de distintas fuentes
D5	Utilizar las tecnologías de la información y de las comunicaciones y manejar herramientas informáticas básicas
D6	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
D7	Aplicar los conocimientos teóricos a la práctica
D8	Trabajar en equipo
D9	Trabajar de forma autónoma
D12	Planificar y gestionar adecuadamente el tiempo
D13	Tomar decisiones
D14	Analizar y sintetizar información y obtener conclusiones
D15	Evaluar de modo crítico y constructivo su entorno y a sí mismo

<b>Resultados de aprendizaje</b>			
Resultados previstos en la materia		Resultados de Formación y Aprendizaje	
Describir unificadamente el campo electromagnético mediante las leyes de Maxwell. Aplicar las condiciones básicas de frontera en el vacío o en presencia de medios materiales.	C3	D1 D12 D14	
Derivar la ecuación de propagación de una onda electromagnética, caracterizada a través de sus principales características. Relacionar este concepto con el espectro electromagnético.	C3	D12 D14	
Explicar los fenómenos empíricos relacionados con la interacción radiación materia no explicados por la Teoría Clásica, y las soluciones propuestas para su resolución (dualidad onda corpúsculo, cuantización de la radiación).	C3	D12 D14 D15	
Enunciar los postulados de la Mecánica Cuántica y sus consecuencias en la reformulación de la teoría microscópica de la Física Clásica.	C3	D1 D12 D14 D15	
Explicar los fundamentos de la teoría de operadores matemáticos, incluyendo los conceptos de función y valor propio, espectro, linealidad y hermiticidad, espacio de funciones, etc.	C3	D1 D9 D12 D14	

Escribir los operadores fundamentales de la Mecánica Cuántica (posición, momento lineal y angular, hamiltoniano de sistemas sencillos).	C3 C19	D1 D9 D12 D14
Aplicar los conceptos previos al estudio mecánico-cuántico de sistemas sencillos, como una partícula sometida a un potencial de pozo cuadrado infinito, o a un potencial armónico, resolviendo la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo.	C3 C19	D1 D3 D6 D8 D12 D13 D14
Calcular las funciones y valores propios del operador de momento angular.	C3 C19	D6 D12 D14
Resolver las ecuaciones de onda del átomo de hidrógeno, calculando sus orbitales.	C3 C19	D6 D8 D12 D14
Resolver la ecuación de Schrödinger para átomos polieletrónicos mediante métodos aproximados.	C3 C19 C20	D1 D5 D6 D9 D12 D13 D14
Explicar de forma sencilla las transiciones entre estados y los espectros de emisión o absorción resultantes.	C3 C19 C20 C22 C23	D1 D6 D8 D9 D12 D14 D15
Enunciar las leyes de la Mecánica Estadística que rigen el comportamiento de sistemas de partículas, particularizado a la estadística de Maxwell Boltzmann. Derivar la función de partición de un sistema y conocer en detalle su significado físico.	C14 C20 C22 C23	D1 D4 D5 D6 D7 D8 D12 D13
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.	C14 C19	D1 D4 D5 D6 D7 D8 D12 D13

## 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. Momento angular y 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 hidrogénicos. Momentos angular y magnético electrónicos. Espín electrónico. Acoplamiento espín-órbita. Estructura hiperfina. Espectros de átomos hidrogénicos.
Átomos polielectrónicos	Aproximación de electrones independientes. Principio de antisimetría. Orbitales de Slater y funciones base. Método SCF-HF. Términos y niveles electrónicos. Espectros de átomos polielectrónicos.
Mecánica Estadística	Nomenclatura y postulados. Colectivo canónico. Función de partición canónica. Sistemas de partículas no interaccionantes. Función de partición molecular. Función de partición canónica de un gas ideal puro. Ley de distribución de Boltzmann para moléculas no interaccionantes. Termodinámica estadística para gases ideales. Introducción al estudio de sistemas reales.

### Planificación

	Horas en clase	Horas fuera de clase	Horas totales
Sesión magistral	26	49.4	75.4
Resolución de problemas y/o ejercicios	26	39	65
Actividades introductorias	1	0.6	1.6
Pruebas de respuesta corta	4	0	4
Pruebas de respuesta larga, de desarrollo	4	0	4

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

### Metodologías

	Descripción
Sesión magistral	Exposición de los aspectos fundamentales de cada tema y planteamiento de aquellos que se van a abordar en los seminarios
Resolución de problemas y/o ejercicios	Resolución de problemas numéricos, cuestiones teóricas y desarrollo de los aspectos teóricos planteados en las Clases Magistrales con la participación del alumno.
Actividades introductorias	Clase de presentación de la asignatura con exposición: de partes del temario, contenidos, reparto en pruebas cortas y examen final, normas generales de evaluación, etc.

### Atención personalizada

Metodologías	Descripción
Sesión magistral	Respuestas a las preguntas relacionadas con la materia que planteen los alumnos en las clases de resolución de problemas y en tutorías. Los alumnos conocerán desde principio de curso los horarios de tutorías de los profesores de la materia. En las tutorías los alumnos podrán revisar sus exámenes.
Resolución de problemas y/o ejercicios	Respuestas a las preguntas relacionadas con la materia que planteen los alumnos en las clases de resolución de problemas y en tutorías. Los alumnos conocerán desde principio de curso los horarios de tutorías de los profesores de la materia. En las tutorías los alumnos podrán revisar sus exámenes.

### Evaluación

	Descripción	Calificación	Resultados de Formación y Aprendizaje
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	Se Celebrarán 2 pruebas de respuesta corta. Se referirán, respectivamente, a la materia de los temas 1 a 3 y 4 a 6. La superación de cada una de ellas permitirá que los alumnos puedan no volver a examinarse de esa materia en el examen final del cuatrimestre, pero no así en el examen de segunda oportunidad (junio-julio).	45
Pruebas de respuesta larga, de desarrollo	Al terminar el curso se celebrará una prueba completa en la que los alumnos que lo deseen podrán repetir aquellos aspectos que no superaron en las pruebas cortas realizadas. Además se examinarán de aquellos temas que, por las limitaciones que impone cualquier cronograma, no pudieron ser evaluados en las pruebas cortas.	45

---

### Otros comentarios sobre la Evaluación

Durante el curso se realizarán dos pruebas cortas referidas a los temas 1-3, la primera, y a los temas 4-6, la segunda. Ambas contendrán problemas y cuestiones y su superación liberará a los alumnos de esa parte de la asignatura. 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. Además, el examen final contendrá apartados (obligatorios para todos los alumnos) que harán referencia a los temas 7 y 8, cuyos contenidos no pudieron evaluarse en las pruebas cortas anteriores, al no permitirlo el cronograma.

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

J. Bertrán y otros, **Química Cuántica**, 2000,  
M. Alonso y E.J. Finn, **Física**, 1976,  
R. Eisberg, y R. Resnick, **Física Cuántica**, 1983,  
I. N. Levine, **Fisicoquímica**, 2004,  
P.W. Atkins y J. de Paula, **Química Física**, 2008,  
I.N. Levine, **Química Cuántica**, 2001,

---

### 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	Seleccione	Curso	Cuatrimestre
	9	OB	2	1c
Lengua Impartición				
Departamento	Química analítica y alimentaria			
Coordinador/a	Pérez Cid, Benita			
Profesorado	González Romero, Elisa Leao Martins, Jose Manuel Pérez Cid, Benita			
Correo-e	benita@uvigo.es			
Web				
Descripción general	El principal objetivo de la materia Química Analítica (I) es 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**

Código	
A5	Que los estudiantes hayan desarrollado aquellas habilidades de aprendizaje necesarias para emprender estudios posteriores con un alto grado de autonomía.
C1	Demostrar conocimiento y comprensión de hechos esenciales, conceptos, principios y teorías en: aspectos principales de la terminología química, nomenclatura, conversiones y unidades.
C2	Demostrar conocimiento y comprensión de hechos esenciales, conceptos, principios y teorías en: tipos de reacción química y sus principales características asociadas
C4	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
C17	Demostrar conocimiento y comprensión de hechos esenciales, conceptos, principios y teorías en: metrología de los procesos químicos, incluyendo la gestión de la calidad
C18	Demostrar conocimiento y comprensión de hechos esenciales, conceptos, principios y teorías en: principios de electroquímica
C19	Aplicar dicho conocimiento y comprensión a la resolución de problemas cuantitativos y cualitativos de naturaleza básica
C20	Evaluar, interpretar y sintetizar datos e información química
C21	Reconocer e implementar buenas prácticas científicas de medida y experimentación
C22	Procesar datos y realizar cálculo computacional relativo a información y datos químicos
C25	Manejar con seguridad sustancias químicas, considerando sus propiedades físicas y químicas, incluyendo la valoración de cualquier riesgo específico asociado con su uso
C26	Realizar procedimientos habituales de laboratorio y utilizar la instrumentación en trabajo sintético y analítico
C27	Monitorizar, mediante observación y medida de propiedades físicas y químicas, sucesos o cambios y documentarlos y registrarlos de manera sistemática y fiable
C28	Interpretar datos derivados de las observaciones y mediciones del laboratorio en términos de su significado y relacionarlos con la teoría adecuada
C29	Demostrar habilidades para los cálculos numéricos y la interpretación de los datos experimentais, con especial énfasis en la precisión y la exactitud
D1	Comunicarse de forma oral y escrita en al menos una de las lenguas oficiales de la Universidad
D3	Aprender de forma autónoma
D4	Buscar y gestionar información procedente de distintas fuentes
D5	Utilizar las tecnologías de la información y de las comunicaciones y manejar herramientas informáticas básicas
D6	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
D7	Aplicar los conocimientos teóricos a la práctica
D8	Trabajar en equipo
D9	Trabajar de forma autónoma
D12	Planificar y gestionar adecuadamente el tiempo
D13	Tomar decisiones
D14	Analizar y sintetizar información y obtener conclusiones
D15	Evaluar de modo crítico y constructivo su entorno y a sí mismo
D16	Desarrollar un compromiso ético

<b>Resultados de aprendizaje</b>			
Resultados previstos en la materia		Resultados de Formación y Aprendizaje	
Reconocer la importancia de la Química Analítica en función de sus objetivos.		C4 C19	D4 D14
Identificar las etapas fundamentales del proceso analítico como metodología para la resolución de problemas y seleccionar con criterio los distintos métodos de análisis.	A5	C4 C19	D4 D14
Describir las propiedades analíticas básicas (exactitud, precisión, sensibilidad y selectividad) y los tipos de errores que pueden afectar a los resultados experimentales.		C19 C20	D1 D4 D6 D14
Describir los aspectos básicos del muestreo y preparación de la muestra para la determinación de sus componentes.		C4 C19	D1 D4 D14
Utilizar la calibración, uso y limpieza del material utilizado en el laboratorio analítico.	A5	C21 C26	D7 D9 D12
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.	A5	C1 C17 C21 C25	D6 D7 D9 D12 D13
Explicar e interpretar los conocimientos básicos de la separación e identificación de especies químicas en disolución para la resolución de un problema analítico, utilizando una sistemática de separación.	A5	C2 C4 C19 C21 C26	D3 D7 D9 D12 D13 D14
Describir los principios del análisis químico cuantitativo (volumétrico y gravimétrico) y sus limitaciones experimentales.		C2 C4 C19	D1 D14
Identificar y evaluar la posible interacción entre reacciones concurrentes ácido-base, de complejación, precipitación y redox.	A5	C2 C18 C19 C20	D7 D9 D12 D14
Elaborar e interpretar curvas de valoración ácido-base, de formación de complejos, de precipitación y redox y saber seleccionar los indicadores más adecuados.	A5	C2 C18 C19 C20	D5 D7 D9 D12 D14
Describir los fundamentos del análisis gravimétrico y los factores que influyen en la pureza de los precipitados.		C2 C20	D1 D4 D14
Llevar a cabo, en el laboratorio, la precipitación y la separación por filtración en las determinaciones gravimétricas.		C2 C17 C19 C21 C25 C26 C28	D7 D8 D12
Utilizar correctamente las técnicas gravimétricas y volumétricas, incluyendo el manejo adecuado del material necesario en cada caso.	A5	C17 C19 C21 C26 C27	D7 D9 D12 D14
Manejar el cálculo sistemático en el análisis volumétrico (valoraciones directas, por retroceso e indirectas) y gravimétrico y saber interpretar los resultados obtenidos.	A5	C20 C22 C28 C29	D6 D7 D14 D15 D16

## 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 los 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. Aplicaciones analíticas.
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)	Estandarización de una disolución de Na <sub>2</sub> -AEDT con Zn (II). (1 sesión)  Determinación de la dureza de una muestra de agua. (1 sesión)
Volumetrías de precipitación (Laboratorio)	Determinación de cloruros en una muestra de agua de mar por el método de Mohr. (1 sesión)
Volumetrías de oxidación-reducción (Laboratorio)	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	26	33	59
Resolución de problemas y/o ejercicios	26	36	62
Prácticas de laboratorio	45.5	12.5	58
Informes/memorias de prácticas	0	6	6
Pruebas de respuesta corta	4	11	15
Pruebas de respuesta larga, de desarrollo	3.5	12	15.5
Pruebas prácticas, de ejecución de tareas reales y/o simuladas.	3.5	6	9.5

\*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 dedicarán dos horas a la resolución de problemas y/o ejercicios propuestos (seminario) 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 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.). Podrán quedar exentos de realizar las prácticas de laboratorio aquellos alumnos que las hayan aprobado en el curso académico 2014-15, si así lo desean. En este caso, se mantendrá, en la parte de laboratorio, la calificación alcanzada en su día.

### 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. Los profesores informarán 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. Los profesores informarán sobre el horario disponible para ello en la presentación de la materia.
Pruebas	Descripción
Informes/memorias de prácticas	Tiempo dedicado por el profesor para atender a todas las dudas y consultas realizadas sobre la materia, durante el curso. Los profesores informarán sobre el horario disponible para ello en la presentación de la materia.

### Evaluación

	Descripción	Calificación	Resultados de Formación y Aprendizaje
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, que deben ser entregados al profesor.	8	C1 D4 C2 D5 C4 D6 C18 D7 C19 D9 C22 D14
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 todas las sesiones de laboratorio. Si el número de ausencias es igual o superior al 25 % de las sesiones de laboratorio, supondrá suspender la asignatura.	15	A5 C1 D6 C2 D7 C4 D8 C17 D9 C18 D12 C19 D13 C20 D14 C21 D15 C22 D16 C25 C26 C27 C28 C29
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 evaluado por el profesor.	5	C20 D1 D3 D6 D9 D12 D14 D15 D16
Pruebas de respuesta corta	Se realizará una primera prueba corta sobre formulación de compuestos químicos y cálculo de concentraciones que supondrá un 7 % de la calificación final.  Se realizará una segunda prueba corta correspondiente a los cuatro primeros temas del programa. Dicha prueba eliminará materia, en caso de ser aprobada y supondrá un 20 % de la calificación final. Los alumnos que no la superen tendrán que examinarse de esta parte de la materia en la prueba final.	27	A5 C1 D1 C2 D3 C4 D4 C19 D5 C20 D6 C22 D7 D9 D12 D13 D14 D16

Pruebas de respuesta larga, de desarrollo	Se realizará una última prueba escrita correspondiente a los cuatro últimos temas del programa. Los alumnos que no hayan superado la prueba correspondiente a los cuatro primeros temas tendrán que examinarse de toda la materia. Dicha prueba se realizará el día del examen final.	30	A5	C1 C2 C4 C18 C19 C20 C22	D1 D3 D4 D5 D6 D7 D9 D12 D13 D14 D16
Pruebas prácticas, de ejecución de tareas reales y/o simuladas.	Al final de las sesiones de laboratorio, se realizará una prueba de laboratorio que permitirá evaluar las competencias y destrezas adquiridas por el alumno. Es necesario superar esta prueba para aprobar la parte práctica de la asignatura.	15	A5	C28 C29	D1 D3 D6 D7 D9 D12 D13 D15 D16

### Otros comentarios sobre la Evaluación

**Primera Convocatoria:** Para superar la asignatura es obligatorio aprobar individualmente cada una de las partes: teoría y prácticas de laboratorio. Para ello, es necesario aprobar las pruebas escritas propuestas y la prueba de laboratorio. La puntuación correspondiente a la parte práctica de la materia (laboratorio) sólo se computará en la nota final una vez aprobada la teoría. La participación del alumno en alguno de los actos de evaluación de la materia implicará la condición de presentado y, por tanto, la asignación de una calificación. Para este efecto, se consideran actos de evaluación la asistencia a clases prácticas de laboratorio (dos o más) y la realización de pruebas escritas.

**Segunda Convocatoria:** En la convocatoria extraordinaria el alumno podrá repetir aquellas pruebas (teoría y/o laboratorio) 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**, 3ª 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	Hervés Beloso, Juan Pablo			
Profesorado	Hervés Beloso, Juan Pablo Mandado Alonso, Marcos			
Correo-e	jherves@uvigo.es			
Web	<a href="http://webs.uvigo.es/qf1_web/">http://webs.uvigo.es/qf1_web/</a>			
Descripción general	<p>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.</p> <p>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.</p>			

**Competencias**

Código	
C6	Demostrar conocimiento y comprensión de hechos esenciales, conceptos, principios y teorías en: principios de termodinámica y sus aplicaciones en Química
C18	Demostrar conocimiento y comprensión de hechos esenciales, conceptos, principios y teorías en: principios de electroquímica
C19	Aplicar dicho conocimiento y comprensión a la resolución de problemas cuantitativos y cualitativos de naturaleza básica
C20	Evaluar, interpretar y sintetizar datos e información química
C23	Presentar material y argumentos científicos de manera oral y escrita a una audiencia especializada
D1	Comunicarse de forma oral y escrita en al menos una de las lenguas oficiales de la Universidad
D3	Aprender de forma autónoma
D4	Buscar y gestionar información procedente de distintas fuentes
D5	Utilizar las tecnologías de la información y de las comunicaciones y manejar herramientas informáticas básicas
D6	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
D7	Aplicar los conocimientos teóricos a la práctica
D8	Trabajar en equipo
D9	Trabajar de forma autónoma
D12	Planificar y gestionar adecuadamente el tiempo
D13	Tomar decisiones
D14	Analizar y sintetizar información y obtener conclusiones
D15	Evaluar de modo crítico y constructivo su entorno y a sí mismo

**Resultados de aprendizaje**

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.	C6	D1
	C19	D3
	C20	D4
	C23	D5
		D6
		D7
		D8
		D9
		D12
		D13
		D14
		D15

Obtener la entropía de una sustancia a partir de medidas calorimétricas	C6 C19 C20 C23	D1 D3 D4 D5 D6 D7 D8 D9 D12 D13 D14 D15
Establecer si un proceso que sufre una sustancia pura es espontáneo o no a partir del cálculo de las variaciones de las propiedades termodinámicas	C6 C19 C20 C23	D1 D3 D4 D5 D6 D7 D8 D9 D12 D13 D14 D15
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	C6 C19 C20 C23	D1 D3 D4 D5 D6 D7 D8 D9 D12 D13 D14 D15
Calcular la función fugacidad para un gas real a partir de su ecuación de estado o bien a partir de medidas experimentales	C6 C19 C20 C23	D1 D3 D4 D5 D6 D7 D8 D9 D12 D13 D14 D15
Calcular la constante termodinámica de reacciones en disolución, a partir de las concentraciones de las especies o a partir de las funciones termodinámicas	C6 C19 C20 C23	D1 D3 D4 D5 D6 D7 D8 D9 D12 D13 D14 D15

Calcular las características termodinámicas de un cambio de fase, y saber el intervalo de aplicabilidad de las ecuaciones empleadas	C6 C19 C20 C23	D1 D3 D4 D5 D6 D7 D8 D9 D12 D13 D14 D15
Calcular las propiedades termodinámicas de una disolución ideal a partir de su composición	C6 C19 C20 C23	D1 D3 D4 D5 D6 D7 D8 D9 D12 D13 D14 D15
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	C6 C19 C20 C23	D1 D3 D4 D5 D6 D7 D8 D9 D12 D13 D14 D15
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	C6 C18 C19 C20 C23	D1 D3 D4 D5 D6 D7 D8 D9 D12 D13 D14 D15
Emplear medidas experimentales procedentes de las células galvánicas para determinar funciones de estado de reacción	C6 C18 C19 C20 C23	D1 D3 D4 D5 D6 D7 D8 D9 D12 D13 D14 D15

Determinar la actividad y/o el coeficiente de actividad iónico medio de un electrolito mediante medidas experimentales de FEM de células galvánicas	C6 C18 C19 C20 C23	D1 D3 D4 D5 D6 D7 D8 D9 D12 D13 D14 D15
Analizar la importancia de la interfase y de los distintos fenómenos asociados a ella en los procesos termodinámicos de los sistemas materiales	C6 C19 C20 C23	D1 D3 D4 D5 D6 D7 D8 D9 D12 D13 D14 D15
Establecer la importancia de la tensión superficial y los distintos procesos asociados en función de la naturaleza del sistema	C6 C19 C20 C23	D1 D3 D4 D5 D6 D7 D8 D9 D12 D13 D14 D15
Diferenciar entre procesos de adsorción física y química y describir los modelos empleados para su descripción	C6 C19 C20 C23	D1 D3 D4 D5 D6 D7 D8 D9 D12 D13 D14 D15

## 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	26	31	57
Seminarios	26	38	64
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 de alumno, bajo la supervisión del profesor.

### Atención personalizada

Pruebas	Descripción
Pruebas de autoevaluación	Los alumnos resolverán de forma autónoma problemas propuestos y serán tutorizados individualmente por el profesor.
Resolución de problemas y/o ejercicios	Los alumnos resolverán de forma autónoma problemas propuestos y serán tutorizados individualmente por el profesor.

### Evaluación

	Descripción	Calificación	Resultados de Formación y Aprendizaje
Resolución de problemas y/o ejercicios	Problemas propuestos para cada tema de la asignatura.	Hasta un 15	C6 C18 C19 C20 C23 D1 D3 D4 D6 D7 D8 D9 D12 D13 D14 D15



Pruebas de autoevaluación	Pruebas tipo test en la plataforma TEMA.	Hasta un 15	C6 C18 C19 C20	D3 D4 D5 D7 D9 D12 D13 D14 D15
Pruebas de respuesta corta	Pruebas escritas cortas sobre ciertas partes de materia.	Hasta un 20	C6 C18 C19 C20	D1 D3 D4 D6 D7 D9 D12 D13 D14 D15
Pruebas de respuesta larga, de desarrollo	Exámen escrito sobre toda la materia de la asignatura.	Mínimo un 65	C6 C18 C19 C20	D1 D3 D4 D6 D7 D9 D12 D13 D14

### 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 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**, Panamericana, 8ª Ed,

Engel, **Química Física**, Pearson,

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

Rodríguez Renuncio, **Termodinámica Química**, Síntesis, 2ª Ed,

Levine, **Problemas de Fisicoquímica**, McGraw-Hill,

Rodríguez Renuncio, **Problemas resueltos de Termodinámica Química**, Síntesis,

Metz, **Fisicoquímica. Problemas y Soluciones**, 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			
Descritores	Creditos ECTS	Selección	Curso	Cuatrimestre
	9	OB	2	1c
Lengua	Castelán			
Impartición	Galego			
Departamento	Química orgánica			
Coordinador/a	Cid Fernández, María Magdalena			
Profesorado	Besada Pereira, Pedro Cid Fernández, María Magdalena Fall Diop, Yagamare García Domínguez, Patricia Iglesias Antelo, María Beatriz Iglesias Randulfe, María Teresa Muñoz López, Luis			
Correo-e	mcid@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-carbono, incluíndo os compostos aromáticos, e carbono-osíxeno.			

**Competencias**

Código	
C2	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: tipos de reacción química e as súas principais características asociadas
C10	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: propiedades dos compostos alifáticos, aromáticos, heterocíclicos e organometálicos
C11	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: natureza e comportamento dos grupos funcionais en moléculas orgánicas
C12	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: trazos estruturais dos elementos químicos e os seus compostos, incluíndo a estereoquímica
C13	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
C19	Aplicar os coñecementos e a comprensión á resolución de problemas cuantitativos e cualitativos de natureza básica
C20	Avaliar, interpretar e sintetizar datos e información química
C21	Recoñecer e implementar boas prácticas científicas de medida e experimentación
C23	Presentar material e argumentos científicos de xeito oral e escrita a unha audiencia especializada
C25	Manexar con seguridade sustancias químicas, considerando as súas propiedades físicas e químicas, incluíndo a valoración de calquera risco específico asociado co seu uso
C26	Realizar procedementos habituais de laboratorio e utilizar a instrumentación en traballos sintéticos e analíticos
C27	Monitorizar, mediante observación e medida de propiedades físicas e químicas, acontecementos ou cambios e documentalos e rexístralos de xeito sistemático e fiable
C28	Interpretar datos derivados das observacións e medicións do laboratorio en termos do seu significado e relacionalos coa teoría adecuada
D1	Comunicarse de forma oral e escrita en polo menos unha das linguas oficiais da Universidade
D3	Aprender de forma autónoma
D4	Procurar e administrar información procedente de distintas fontes
D5	Utilizar as tecnoloxías da información e das comunicacións e manexar ferramentas informáticas básicas
D7	Aplicar os coñecementos teóricos á práctica
D8	Traballar en equipo
D9	Traballar de forma autónoma
D12	Planificar e administrar adecuadamente o tempo
D13	Tomar decisións
D14	Analizar e sintetizar información e obter conclusións
D15	Avaliar de modo crítico e construtivo o entorno e a si mesmo

**Resultados de aprendizaxe**

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.	C2 C19	D1 D3 D4 D7 D9 D12 D14
Establecer a influencia da estrutura e as características químicas dos grupos funcionais presentes nunha molécula na súa reactividade.	C2 C11	D1 D3 D4 D7 D9 D12 D14
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	C2 C10 C11 C13	D1 D3 D4 D7 D9 D12 D14
Explicar a reactividade de compostos orgánicos con enlaces múltiples carbono-carbono mediante un mecanismo de adición electrófila.	C2 C10 C11 C13	D1 D3 D4 D7 D9 D12 D14
Explicar a reactividade dos compostos aromáticos a través dun mecanismo de substitución electrófila.	C2 C10 C11 C13	D1 D3 D4 D7 D9 D12 D14
Describir detalladamente para cada transformación o mecanismo de reacción adecuado, indicando etapas de reacción, estados de transición, intermedios etc.	C2 C11	D1 D3 D4 D7 D9 D12 D14
Predicir o resultado da reacción dun substrato concreto cun reactivo dado nunhas condicións determinadas, no concernente á rexioselectividade e estereoselectividade da reacción.	C11 C12 C13 C19	D1 D3 D4 D7 D9 D12 D14
Aplicar as normas de seguridade e hixiene no traballo de laboratorio e levar a cabo o tratamento e a eliminación correcta dos residuos xerados.	C25	D1 D3 D4 D7 D9 D12 D13 D14 D15
Realizar correctamente os procedementos experimentais habituais en preparacións orgánicas sinxelas.	C21 C26	D1 D3 D4 D7 D9 D12 D13 D14

Levar a cabo a elaboración do produto dunha reacción, así como o seu illamento e purificación mediante técnicas habituais (extracción, destilación, recristalización e cromatografía).	C21	D1
	C26	D3
	C27	D4
		D7
		D9
		D12
		D13
		D14
Redactar e describir de forma axeitada os experimentos realizados no caderno de laboratorio, de modo que sexan reproducibles.	C23	D1
	C27	D3
	C28	D4
		D7
		D9
		D12
		D13
		D14
		D15
Buscar e seleccionar información sobre os temas estudados.	C20	D4
		D5
		D8
		D14
		D15

## Contidos

Tema	
Tema 1. Reactividade dos compostos orgánicos	Tipos de reaccións orgánicas: adición, eliminación, substitución, condensación, transposición. Mecanismos de reacción: reaccións concertadas e por pasos. Perfil enerxético dunha reacción. Control cinético e control termodinámico. Ruptura homolítica e heterolítica: reaccións radicalarias e iónicas. Intermedios de reacción: radicais libres, carbocatións e carbanións. Estrutura e estabilidade. Tipos de reactivos: ácidos/bases, oxidantes/reductores e electrófilos/nucleófilos.
Tema 2. Estrutura e reactividade de grupos funcionais	Estereoisomería configuracional. Alcanos e cicloalcanos. Compostos orgánicos que conteñen grupos funcionais con enlaces sencillos carbono-heteroátomo (nitróxeno, osíxeno, halóxenos, metais, xofre). Acidez e basicidade de aminas e alcois.
Tema 3. Reaccións de adición a enlaces múltiples carbono-carbono	Estrutura e reactividade xeral dos grupos funcionais con enlaces múltiples carbono-carbono: alquenos, alquinos e dienos conxugados. Acidez dos alquinos terminais. Hidroxenación (calores de hidroxenación e estabilidade de alquenos e dienos). Reaccións de adición electrófila a alquenos: adición de HX: rexioselectividade; reaccións de hidratación, orientación e estereoquímica; adición de X <sub>2</sub> ; reaccións de hidroxilación. Reaccións de adición a alquinos. Reaccións de adición electrófila a dienos conxugados.
Tema 4. Reaccións de substitución aromática	Estrutura e reactividade xeral dos compostos aromáticos 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 sistemas aromáticos substituídos: orientación e reactividade. Reaccións de substitución electrófila aromática en fenóis e aminas aromáticas. Sales de diazonio: reactividade. Reaccións de substitución nucleófila aromática
Tema 5. Reaccións de adición nucleófila a grupos carbonilo	Estrutura e reactividade xeral do grupo carbonilo (aldehídos e cetonas). Tautomería ceto-enólica. Mecanismo xeral da adición nucleófila. Adicións nucleófilas non reversibles: adición de compostos organometálicos (alquinos, organolíticos e magnesianos), adición de iluros de fósforo (reacción de Wittig); adición de hidruro (redución de compostos carbonílicos a alcois). Reaccións de adición nucleófila reversibles: adición de compostos osixenados e de xofre (auga, alcois e tiois); adición de compostos nitroxenados (aminas e outros compostos nitroxenados); adición de cianuro de hidróxeno.

Tema 6. Reaccións de substitución nucleófila sobre grupos carbonilo

Estrutura e reactividade xeral dos ácidos carboxílicos e derivados de ácido. Acidez dos ácidos carboxílicos. Acidez e basicidade de amidas. Mecanismo xeral de adición-eliminación. Características estruturais e reactividade relativa dos derivados de ácido. Reaccións de hidrólise. Reaccións de esterificación e transesterificación. Reaccións de amonólise. Reaccións con organometálicos. Estrutura e reactividade dos nitrilos. Hidrólise de nitrilos. Reaccións con organometálicos.

Práctica 1	Separación dunha mezcla de tres compostos (ácido acetilsalicílico, paracetamol e cafeína) utilizando dous métodos: A) Extracción ácido-base e B) Cromatografía en columna (tres sesións).
Práctica 2	Adición electrófila a un dobre enlace: Bromación (unha sesión)
Práctica 3	Substitución electrófila aromática: Nitración (unha sesión).
Práctica 4	Reducción dunha cetona (unha sesión)
Práctica 5	Adición nucleófila ao grupo carbonilo: Síntese de Wittig (unha sesión).
Práctica 6	Extracción dun éster natural (trimiristina) e hidrólise básica do mesmo (dúas sesións)
Práctica 7	Síntese por pasos: Preparación de benzocaína a partir da para-toluidina (catro sesións)

### Planificación

	Horas en clase	Horas fuera de clase	Horas totales
Sesión maxistral	26	29	55
Resolución de problemas e/ou exercicios	26	49	75
Prácticas de laboratorio	45.5	13	58.5
Probas de resposta curta	4	10	14
Probas de resposta longa, de desenvolvemento	4	12.5	16.5
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

	Descripción
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.
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, ademáis se elaborarán traballos sobre temas concretos propostos polo profesor.
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 preparar previamente os 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. Ao final deberá contestar a cuestións relacionadas co traballo realizado

### Atención personalizada

Metodoloxías	Descripción
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

### Avaliación

Descripción	Calificación	Resultados de Formación y Aprendizaje

Resolución de problemas e/ou exercicios	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.	25	C2 C10 C11 C12 C13 C19 C20 C23	D1 D3 D4 D5 D7 D8 D9 D14
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.				
Prácticas de laboratorio	A asistencia ás clases prácticas é obrigatoria.	30	C21 C25 C26 C27 C28	D12 D13 D14 D15
O alumno para superar a materia deberá acadar alomenos o 50% da puntuación máxima posible para este apartado. Valorarase o seguinte:				
-Seguimento do traballo do laboratorio (Ficha previa, Organización e pulcritude no laboratorio, Caderno de laboratorio, Cuestións finais). A cualificación neste apartado só será considerada se o estudante realiza un mínimo do 80% das entregas (18%)				
- Proba práctica (na que tamén figurarán cuestións teóricas sobre a práctica realizada no exame) que permitirá avaliar as competencias e destrezas adquiridas polo alumno (explicitamente terase en conta a avaliación de riscos, CE25). Dita proba realizarase de xeito independente para cada grupo de prácticas e terá lugar ao remate das sesións de laboratorio (12%).				
Alumnos de 2ª, 3ª, etc. convocatoria:				
Teñen o mesmo réxime de asistencia que os que cursen a materia por primeira vez coa salvedade seguinte:				
-Aqueles alumnos que aprobaron as prácticas de laboratorio no curso 2014/2015 conserváraselles a cualificación obtida durante o presente curso académico.				
Probos de resposta curta	Realizaranse dúas probas breves, unha ao rematar o tema 3 e outra o tema 6, que abarcarán o temario explicado	20	C2 C10 C11 C12 C13 C19	D3 D7 D12 D14
Probos de resposta longa, de desenvolvemento	Unha proba global para a avaliación das competencias adquiridas na materia, realizarase tras a impartición da mesma. 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). 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 cuadrimestre ponderada	25	C2 C10 C11 C12 C13 C19	D3 D7 D12 D14

### 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 mais), a realización de probas 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 cuadrimestre 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 cuadrimestre, o profesorado proporá 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 parcialmente 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.

**c)** Ademais, poderán recuperar a **proba práctica de laboratorio** aqueles estudantes que teñan superada a parte teórica da materia.

Esta cualificación substituirá a acadada na proba práctica 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.

No caso de que esta cualificación sexa inferior á obtida na avaliación de fin de cuatrimestre, a cualificación que figurará na acta será esta última

---

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

KLEIN, D., **Química Orgánica**, 1ª edición en castelán,

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

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

### **Bibliografía complementaria**

- 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, 2ª Ed. 2012.

- YURKANIS BRUICE, P. "Química Orgánica", 5ª edición en castelán, Editorial Pearson-Prentice-Hall (2008)

- DOBADO, J.A., GARCÍA-CALVO, F., GARCÍA, J.I. "*Química Orgánica: Ejercicios comentados*", Garceta, 2012

- 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 continúan el temario**

Química orgánica II/V11G200V01504

Química orgánica III/V11G200V01704

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

Física III/V11G200V01301

Química analítica I/V11G200V01302

Química física I/V11G200V01303

#### **Asignaturas que se recomienda 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

Ferramentas informáticas e de comunicación en química/V11G200V01401

#### **Otros comentarios**

Materias que continúan o temario:

Química Orgánica II e Química Orgánica III



<b>DATOS IDENTIFICATIVOS</b>				
<b>IT tools and communication in chemistry</b>				
Asignatura	IT tools and communication in chemistry			
Código	V11G200V01401			
Titulación	(*)Grao en Química			
Descriptor	Creditos ECTS	Seleccione	Curso	Cuatrimestre
	6	OB	2nd	2nd
Lengua Impartición	English			
Departamento				
Coordinador/a	Correa Duarte, Miguel Ángel			
Profesorado	Correa Duarte, Miguel Ángel Pérez Juste, Jorge Silva López, Carlos			
Correo-e	macorrea@uvigo.es			
Web				
Descripción general	The course aims to familiarize students with the use of chemical information sources (scientific and technical in general) with emphasis on its use through the Internet, as well as with the use of all types of software tools for statistical calculations and chemical modeling . Attention is also paid to the acquisition of important communication skills (writing scientific and technical documents, academic, web design, etc).			

<b>Competencies</b>	
Código	
C22	Process and perform computational calculations with chemical information and chemical data
C23	Present oral and written scientific material and scientific arguments to a specialized audience
D1	Communicate orally and in writing in at least one of the official languages of the University
D2	Communicate at a basic level in English in the field of chemistry
D3	Learn independently
D4	Search and manage information from different sources
D5	Use information and communication technologies and manage basic computer tools
D6	Use mathematics, including error analysis, estimates of orders of magnitude, correct use of units and data representations
D7	Apply theoretical knowledge in practice
D8	Teamwork
D9	Work independently
D10	Work at a national and international context
D14	Analyze and synthesize information and draw conclusions
D15	Evaluate critically and constructively the environment and oneself
D16	Develop an ethical commitment
D18	Generate new ideas and show initiative

<b>Learning outcomes</b>	
Resultados previstos en la materia	Resultados de Formación y Aprendizaje
To know the different sources of scientific and technical information	C23 D1 D2 D4 D5 D9 D14 D16
To understand the basics of running a Science library and know how to perform an advanced use of its services	D2 D4 D5 D8 D9 D14

To classify scientific journals based on their theme or objective	C23	D1 D2 D3 D5 D8 D9 D10 D15 D18
To know the basic characteristics of other sources: technical reports, conference proceedings, patents, dissertations, government publications, standards, videos, dictionaries, encyclopedias, directories, databases and "handbooks".	C23	D1 D2 D5 D8 D10 D16
To know the basic characteristics of other sources: technical reports, conference proceedings, patents, dissertations, government publications, standards, videos, dictionaries, encyclopedias, directories, databases and "handbooks".	C23	D1 D2 D5 D8 D10 D16
To know the structure and function of an abstracting or indexing service	C23	D1 D2 D5 D8 D10 D16
To know how to use statistical program packages to perform data fitting, graphical and other kinds of statistical analysis	C22	D3 D5 D6 D7 D9 D14 D16

## Contents

Tema	
The scientific literature: general aspects.	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 Encyclopedias Databases
Using Internet	Basic Internet services.  Remote connection and file transfer utilities.  Search engines.  Electronic lists and subscription services.  Other services.  Structure, function and design of web pages.

Indexing and abstracting services	<p>Identification of a scientific paper.</p> <p>The ISI Web of Knowledge (WOK).</p> <p>The Chemical Abstract Service (CAS) and the Scifinder.</p> <p>Other abstracting services.</p> <p>Handbooks.</p>
Bibliographic Managers	<p>Classification of bibliographic references: general principles.</p> <p>Use of popular software packages:</p> <p>Reflows and Endnote as examples.</p>
Preparation of a scientific, technical or academic document	<p>Parts of a scientific document.</p> <p>References, tables and figures : general principles.</p> <p>Use of computer templates.</p> <p>General aspects of the scientific style and the use of English.</p> <p>How to write: CVs, progress reports, grant requests and other academic documents.</p>

<b>Planning</b>			
	Horas en clase	Horas fuera de clase	Horas totales
Master Session	14	28	42
Practice in computer rooms	26	52	78
Troubleshooting and / or exercises	2	22	24
Long answer tests and development	1.5	4.5	6

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

<b>Methodologies</b>	
	Descripción
Master Session	The theoretical aspects of the subject are presented
Practice in computer rooms	Computer lab exercises: literature searches, use of bibliographic managers, use of statistical packages, report writing.
Troubleshooting and / or exercises	Report or article writing in English language. Simple exercises with modelling software

<b>Personalized attention</b>	
Metodologías	Descripción
Practice in computer rooms	The student is helped by providing adequate guidelines. Since all lectures are given in the computer room, the student will be helped mostly there in a practical and effective way.
Troubleshooting and / or exercises	The student is helped by providing adequate guidelines. Since all lectures are given in the computer room, the student will be helped mostly there in a practical and effective way.

<b>Assessment</b>				
	Descripción	Calificación	Resultados de Formación y Aprendizaje	
Practice in computer rooms	Typically, literature searches	20	C22 C23	D1 D2 D3 D4 D5 D9 D15 D16

Troubleshooting and / or exercises	Typically, database searches and use of utilities of modelling software.	40	C22 C23	D1 D2 D3 D4 D5 D8 D10 D14 D15 D18
Long answer tests and development		Written exam consisting of short questions.	40	D1 D2 D14 D15

### Otros comentarios sobre la Evaluación

Attendance at practical lectures (seminars) is compulsory. The student will be given a rating (0-10) as long as he/she has attended 3 or more seminar sessions, has delivered at least two reports on the exercises or practices proposed by the teacher or has done a written exam.

If the student fails in the first call he/she will be asked to improve some of the exercises or perform new ones provided by the teacher. In addition he/she will have to undergo a more thorough exam, which will weight 50% of the final grade.

### Sources of information

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

Kaplan, S.M., **The English-Spanish Spanish-English dictionary of chemistry**, 2<sup>a</sup>,

Day, R.A.; Gastel, B., **How to write and publish a scientific paper**, 7<sup>a</sup>,

### Recommendations

#### Asignaturas que se recomienda cursar simultáneamente

Numerical methods in chemistry/V11G200V01402

Physical chemistry II/V11G200V01403

Inorganic chemistry I/V11G200V01404

#### Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente

Physics: Physics I/V11G200V01102

Physics: Physics II/V11G200V01201

Chemistry: Chemistry I/V11G200V01105

Chemistry: Chemistry II/V11G200V01204

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

Asignatura	Métodos numéricos en química			
Código	V11G200V01402			
Titulación	Grao en Química			
Descritores	Creditos ECTS	Seleccione	Curso	Cuatrimestre
	6	OB	2	2c
Lengua Impartición				
Departamento	Matemáticas Química analítica e alimentaria Química Física			
Coordinador/a	Besada Morais, Manuel			
Profesorado	Bendicho Hernández, José Carlos Besada Morais, Manuel Hermida Ramón, José 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**

Código	
A2	Que os estudantes saiban aplicar os seus coñecementos ó seu traballo ou vocación dunha forma profesional e posúan as competencias que adoitan demostrarse por medio da elaboración e defensa de argumentos e a resolución de problemas dentro da súa área de estudo.
A3	Que os estudantes teñan a capacidade de reunir e interpretar datos relevantes (normalmente dentro da súa área de estudo) para emitir xuízos que inclúan unha reflexión sobre temas relevantes de índole social, científica ou ética.
A5	Que os estudantes desenvolvan aquelas habilidades de aprendizaxe necesarias para emprender estudos posteriores cun alto grao de autonomía.
C19	Aplicar os coñecementos e a comprensión á resolución de problemas cuantitativos e cualitativos de natureza básica
C20	Avaliar, interpretar e sintetizar datos e información química
C22	Procesar datos e realizar cálculo computacional relativo a información e datos químicos
C29	Demostrar habilidades para os cálculos numéricos e a interpretación dos datos experimentais, con especial énfase na precisión e a exactitude
D1	Comunicarse de forma oral e escrita en polo menos unha das linguas oficiais da Universidade
D3	Aprender de forma autónoma
D4	Procurar e administrar información procedente de distintas fontes
D5	Utilizar as tecnoloxías da información e das comunicacións e manexar ferramentas informáticas básicas
D6	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
D7	Aplicar os coñecementos teóricos á práctica
D9	Traballar de forma autónoma
D12	Planificar e administrar adecuadamente o tempo
D13	Tomar decisións
D14	Analizar e sintetizar información e obter conclusións

**Resultados de aprendizaxe**

Resultados previstos en la materia	Resultados de Formación y Aprendizaje		
Utilizar os paquetes numéricos e simbólicos de MATLAB.		C22 C29	D5
Controlar distintas bases de numeración e decatarse da existencia de erros cometidos nas aproximacións	A3	C29	D6 D9 D13 D14

Buscar aproximacións de raíces de ecuacións dunha variable e sistemas de ecuacións.

A2 C19 D1  
 A3 C22 D3  
 A5 C29 D4  
 D5  
 D6  
 D7  
 D9  
 D12  
 D13  
 D14

Utilizar polinomios que se axustan a varios puntos do plano.

A2 C19 D1  
 A3 C20 D3  
 A5 C22 D4  
 C29 D5  
 D6  
 D7  
 D9  
 D12  
 D13  
 D14

Derivar e integrar numericamente, relacionar estes conceptos numéricos e analíticos e entender o porque da súa necesidade.

A2 C19 D1  
 A3 C20 D3  
 A5 C22 D4  
 C29 D5  
 D6  
 D7  
 D9  
 D12  
 D13  
 D14

Manexar axustes de datos a distintos tipos de curvas de elección previa mediante paquetes informáticos.

A2 C19 D1  
 A3 C20 D3  
 A5 C22 D4  
 C29 D5  
 D6  
 D7  
 D9  
 D12  
 D13  
 D14

### Contidos

Tema	
Tema 1. Introducción a análise numerica.	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	13	26	39
Prácticas en aulas de informática	26	52	78
Probos de tipo test	4	12	16
Resolución de problemas e/ou exercicios	2	8	10
Traballos e proxectos	0	7	7

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

<b>Metodoloxía docente</b>	
	Descrición
Sesión maxistral	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.

<b>Atención personalizada</b>	
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.

<b>Avaliación</b>				
	Descrición	Calificación	Resultados de Formación y Aprendizaje	
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	C19 C20 C22 C29	D6
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	C19 C20 C22 C29	D6
Resolución de problemas e/ou exercicios	Ó finalizar o curso realizaráse unha proba práctica resolvendo algúns exercicios prácticos na aula de informática	30	C19 C20 C22 C29	D6
Traballos e proxectos	Participación con aproveitamento en todas as actividades propostas polo profesorado, sexan estas para realizar dentro ou fóra da aula.	10	C19 C20 C22 C29	D6

### **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, que poderán ser recuperadas, e as dúas probas realizadas ó final de curso que serán avaliadas no exame correspondente. Neste caso, o alumno ten que poñerse en contacto co profesor con suficiente antelación para acordar o traballo a realizar antes das probas finais.

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 (catro ou mais), a realización dalgunha proba 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 recomienda haber cursado previamente**

Matemáticas: Matemáticas I/V11G200V01104  
 Matemáticas: Matemáticas II/V11G200V01203

<b>DATOS IDENTIFICATIVOS</b>				
<b>Química física II</b>				
Asignatura	Química física II			
Código	V11G200V01403			
Titulación	Grao en Química			
Descriptor	Creditos ECTS	Seleccione	Curso	Cuatrimestre
	9	OB	2	2c
Lengua	Castelán			
Impartición				
Departamento	Química Física			
Coordinador/a	Mosquera Castro, Ricardo Antonio			
Profesorado	Correa Duarte, Miguel Ángel Graña Rodríguez, Ana María Mosquera Castro, Ricardo Antonio Pastoriza Santos, Isabel Peña Gallego, María de los Ángeles Pérez Juste, Ignacio			
Correo-e	mosquera@uvigo.es			
Web				
Descripción general	Aplicación dos principios e métodos da Mecánica Cuántica ao estudo da estrutura molecular e a espectroscopía.			

<b>Competencias</b>	
Código	
C3	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
C6	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: principios de Termodinámica e as súas aplicacións en Química
C8	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: principais técnicas de investigación estrutural, incluíndo a Espectroscopía
C19	Aplicar os coñecementos e a comprensión á resolución de problemas cuantitativos e cualitativos de natureza básica
C20	Avaliar, interpretar e sintetizar datos e información química
C21	Recoñecer e implementar boas prácticas científicas de medida e experimentación
C22	Procesar datos e realizar cálculo computacional relativo a información e datos químicos
C23	Presentar material e argumentos científicos de xeito oral e escrita a unha audiencia especializada
C27	Monitorizar, mediante observación e medida de propiedades físicas e químicas, acontecementos ou cambios e documentalos e rexistralos de xeito sistemático e fiable
C28	Interpretar datos derivados das observacións e medicións do laboratorio en termos do seu significado e relacionalos coa teoría adecuada
C29	Demostrar habilidades para os cálculos numéricos e a interpretación dos datos experimentais, con especial énfase na precisión e a exactitude
D1	Comunicarse de forma oral e escrita en polo menos unha das linguas oficiais da Universidade
D3	Aprender de forma autónoma
D4	Procurar e administrar información procedente de distintas fontes
D5	Utilizar as tecnoloxías da información e das comunicacións e manexar ferramentas informáticas básicas
D6	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
D7	Aplicar os coñecementos teóricos á práctica
D8	Traballar en equipo
D9	Traballar de forma autónoma
D12	Planificar e administrar adecuadamente o tempo
D13	Tomar decisións
D14	Analizar e sintetizar información e obter conclusións
D15	Avaliar de modo crítico e construtivo o entorno e a si mesmo

<b>Resultados de aprendizaxe</b>	<b>Resultados de Formación y Aprendizaje</b>	
Resultados previstos en la materia		
Formular hamiltonianos moleculares, utilizar sobre eles a aproximación de Born-Oppenheimer e discutir as súas consecuencias.	C3 C19	D1 D3 D4 D6 D9



Manexar superficies e perfís de enerxía potencial e os conceptos relativos a elas.	C3 C19 C20 C22 C28 C29	D1 D3 D4 D5 D6 D7 D9 D12 D13 D14
Aplicar os métodos OM e EV para a descrición do enlace químico en sistemas simples e coñecer (coa súa orixe) as limitacións destes métodos.	C19	D1 D3 D4 D6 D7 D9
Describir as técnicas de localización orbital e o fundamento da hibridación de orbitais atómicos.	C3	D1 D3 D4 D6 D9
Aplicar (coñecendo fundamentos e limitacións) os principais métodos de cálculo para o estudo de estruturas moleculares (HF, post-HF, DFT...).	C3 C19 C20 C22 C23 C28 C29	D1 D3 D4 D5 D6 D7 D9 D12 D13 D14
Describir as formas de interacción radiación-materia e formular regras de selección de dipolo eléctrico.	C8	D1 D3 D4 D6 D9
Vincular a frecuencia da radiación co movemento molecular responsable dunha transición espectroscópica.	C8	D1 D3 D4 D6 D7 D9
Xustificar o ensanchamento das liñas espectrais e o efecto do medio sobre os espectros.	C8	D1 D3 D4 D6 D9
Interpretar espectros de rotación e vibración-rotación para obter información estrutural, facendo uso dos modelos cuánticos simples (rotor ríxido e elástico e osciladores harmónico e anarmónico), regras de selección e técnicas de asignación de liñas.	C3 C8 C19 C20 C22 C23 C27 C28 C29	D1 D3 D4 D5 D6 D7 D9 D12 D13 D14
Discutir o principio de Franck-Condon e as súas consecuencias.	C3 C8	D1 D3 D4 D6 D9

Interpretar espectros electrónicos, determinando información estrutural a partir deles, e coñecer os seus fundamentos.	C3 C8 C19 C22	D1 D3 D4 D5 D6 D7 D9
Describir os diferentes procesos de desactivación de estados electrónicos excitados.	C8 C19	D1 D3 D4 D6 D9
Describir os fundamentos das espectroscopias de resonancia magnética e interpretar a orixe física do desprazamento químico e dos acoplamentos presentes nos espectros de RMN.	C8 C19 C22	D1 D3 D4 D6 D9
Describir as peculiaridades instrumentais das técnicas espectroscópicas nas diferentes rexións espectrais.	C8	D1 D3 D4 D6 D9
Aplicar os coñecementos teóricos adquiridos en Química Física I para determinar experimentalmente constantes de equilibrio químico, coeficientes de actividade e magnitudes termoquímicas.	C6 C19 C20 C21 C23 C27 C28 C29	D1 D3 D4 D5 D6 D7 D8 D9 D12 D13 D14 D15

Nova

## Contidos

### Tema

Estrutura Electrónica das Moléculas Diatómicas.	- Aproximación de Born-Oppenheimer. - Molécula H <sub>2</sub> <sup>+</sup> . Método OM. - Molécula H <sub>2</sub> . Métodos OM e EV. - Método OM para moléculas diatómicas homo e heteronucleares. - Método de Hartree-Fock. Conxuntos base.
Estrutura Electrónica das Moléculas Poliatómicas.	- Método OM en moléculas poliatómicas. - Métodos semiempíricos. Método de Hückel. - Cálculo de propiedades moleculares - Outros métodos en Química Computacional.
Introdución á Espectroscopia Molecular.	- Interacción radiación-materia. Plantexamento xeral. - Integral momento dipolar de transición. Regras de selección. - Intensidade e posición das transicións espectrais.
Espectroscopia de Rotación.	- Espectros de rotación pura de moléculas diatómicas. Modelos do rotor ríxido e elástico. - Espectros de rotación pura 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. - Estrutura de vibración. Principio de Franck-Condon. - Estrutura fina de rotación. - Espectros electrónicos de moléculas poliatómicas.
Espectroscopias de Resonancia.	- Introdución á resonancia magnética. - Desprazamento químico. - Interacción espín-espín. Constante de acoplamento. - Espectroscopia de resonancia de espín electrónico.

Prácticas de Termodinámica Química (seis sesións)	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Determinación experimental de constantes de equilibrio empregando técnicas espectrofotométricas ou potenciométricas.</li> <li>- Determinación experimental de entalpías de combustión, disolución, neutralización, fusión ou vaporización.</li> <li>- Propiedades coligativas.</li> <li>- Determinación experimental de coeficientes de actividade empregando unha técnica potenciométrica.</li> </ul>
Prácticas de Química Cuántica e Espectroscopia (sete sesións).	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Estudo teórico da estrutura molecular das moléculas H<sub>2</sub> y H<sub>2</sub><sup>+</sup>.</li> <li>- Estudo teórico da estrutura molecular de outras moléculas diatómicas.</li> <li>- Isomería conformacional e rotación interna no n-butano.</li> <li>- Predicción, interpretación teórica e resolución do espectro de vibración-rotación do HCl en fase gas.</li> <li>- Espectroscopia electrónica: Espectro da molécula de I<sub>2</sub> en fase gas.</li> </ul>

### Planificación

	Horas en clase	Horas fuera de clase	Horas totales
Sesión maxistral	26	39	65
Seminarios	26	39	65
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	5	7
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 dispoñible na plataforma TEM@ (esquemas, boletíns de problemas, ...). Ademais da exposición de temas, tamén se formularán problemas numéricos que axuden a comprender e asentar 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> </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, elaborado seguindo as directrices dadas polo profesor.
Resolución de problemas e/ou exercicios de forma autónoma	Para cada un dos temas, propoñeranse determinados "Problemas Avaliables" ou outros traballos que o alumno deberá resolver ou realizar para entregar ao profesor no prazo que se fixe.

### Atención personalizada

Metodoloxías	Descrición
Sesión maxistral	No horario de titorias do profesor resolveranse de forma individualizada e máis persoal aquelas dúbidas dos alumnos que poidan xurdir ó longo do curso en calquera dos seus aspectos (clases de teoría ou seminario, clases de laboratorio e os distintos tipos de actividades autónomas a realizar).
Seminarios	No horario de titorias do profesor resolveranse de forma individualizada e máis persoal aquelas dúbidas dos alumnos que poidan xurdir ó longo do curso en calquera dos seus aspectos (clases de teoría ou seminario, clases de laboratorio e os distintos tipos de actividades autónomas a realizar).

Prácticas de laboratorio	No horario de titorías do profesor resolveranse de forma individualizada e máis persoal aquelas dúbidas dos alumnos que poidan xurdir ó longo do curso en calquera dos seus aspectos (clases de teoría ou seminario, clases de laboratorio e os distintos tipos de actividades autónomas a realizar).
Resolución de problemas e/ou exercicios de forma autónoma	No horario de titorías do profesor resolveranse de forma individualizada e máis persoal aquelas dúbidas dos alumnos que poidan xurdir ó longo do curso en calquera dos seus aspectos (clases de teoría ou seminario, clases de laboratorio e os distintos tipos de actividades autónomas a realizar).
<b>Pruebas</b>	<b>Descripción</b>
Probas de resposta longa, de desenvolvemento	No horario de titorías do profesor resolveranse de forma individualizada e máis persoal aquelas dúbidas dos alumnos que poidan xurdir ó longo do curso en calquera dos seus aspectos (clases de teoría ou seminario, clases de laboratorio e os distintos tipos de actividades autónomas a realizar).
Informes/memorias de prácticas	No horario de titorías do profesor resolveranse de forma individualizada e máis persoal aquelas dúbidas dos alumnos que poidan xurdir ó longo do curso en calquera dos seus aspectos (clases de teoría ou seminario, clases de laboratorio e os distintos tipos de actividades autónomas a realizar).
Probas de resposta curta	No horario de titorías do profesor resolveranse de forma individualizada e máis persoal aquelas dúbidas dos alumnos que poidan xurdir ó longo do curso en calquera dos seus aspectos (clases de teoría ou seminario, clases de laboratorio e os distintos tipos de actividades autónomas a realizar).
Probas de tipo test	No horario de titorías do profesor resolveranse de forma individualizada e máis persoal aquelas dúbidas dos alumnos que poidan xurdir ó longo do curso en calquera dos seus aspectos (clases de teoría ou seminario, clases de laboratorio e os distintos tipos de actividades autónomas a realizar).
Probas prácticas, de execución de tarefas reais e/ou simuladas.	No horario de titorías do profesor resolveranse de forma individualizada e máis persoal aquelas dúbidas dos alumnos que poidan xurdir ó longo do curso en calquera dos seus aspectos (clases de teoría ou seminario, clases de laboratorio e os distintos tipos de actividades autónomas a realizar).

## **Avaliación**

	Descripción	Calificación	Resultados de Formación y Aprendizaje	
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.	ata 12,0	C3 C6 C8 C19 C20 C21 C22 C27 C28	D1 D4 D5 D6 D7 D8 D12 D13 D14 D15
Resolución de problemas e/ou exercicios de forma autónoma	Serán propostos "Problemas Avaliables" ou outros traballos que o alumno deberá resolver ou realizar autónomamente e entregará. E unha actividade voluntaria	ata 7	C3 C8 C19 C20 C22 C23	D1 D3 D4 D5 D6 D9 D12 D13 D14 D15
Probas de resposta longa, de desenvolvemento	Realización dunha proba escrita global (3,5 horas de duración) ao final do cuadrimestre, na data fixada pola Xunta de Facultade.	como mínimo 45,5	C3 C8 C19 C20 C22	D1 D3 D6 D9 D12 D14 D15

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.	ata 6,0	C3 C6 C8 C19 C20 C22 C23 C27 C28 C29	D1 D3 D4 D5 D6 D8 D9 D12 D14
Probas de resposta curta	Realización ao longo do cuadrimestre, nas datas fixadas pola Xunta de Facultade, de dúas probas curtas (aproximadamente 1,5 horas de duración) de carácter non liberatorio.	ata 14	C3 C8 C19 C20 C22	D1 D3 D6 D9 D12 D14 D15
Probas de tipo test	Ao rematar cada tema ou grupo de temas o alumno terá, a través da plataforma TEM@, a posibilidade de responder un "test de autoavaliación" autocorrixible.	ata 3,5	C3 C8 C19	D3 D4 D6 D7 D9 D12 D14 D15
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	C3 C6 C8 C19 C21 C22 C28 C29	D1 D3 D4 D6 D7 D9 D12 D13 D14 D15

### 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 (65%), resolución de problemas/traballos (10%), test de autoavaliación (5%)), 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 unicamente a cualificación deste exame, non contabilizándose ningún dos demais apartados. Debe subliñarse que a proba longa ten un 65% de valor como mínimo, xa que a participación o resto das actividades avaliábeis na parte teórica da asignatura é recomendable, pero voluntaria. E dicir, os estudantes poden optar por presentarse exclusivamente o exame final e ser avaliados da parte teórica unicamente por ese exame, que daría nese caso o 100% da cualificación da parte teórica.

#### Parte Práctica:

A avaliación da **parte práctica** contribuirá, no seu conxunto (prácticas de laboratorio (40%), informes (20%) e proba escrita de prácticas (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 longa ou a asistencia a mais de cinco sesións 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 os correspondentes informes 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.

---

### **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 Prentice 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).

---

### **Recomendacións**

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

Ferramentas informáticas e de comunicación en química/V11G200V01401

Métodos numéricos en química/V11G200V01402

Química inorgánica I/V11G200V01404

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

Matemáticas: Matemáticas I/V11G200V01104

Matemáticas: Matemáticas II/V11G200V01203

Física III/V11G200V01301

Química física I/V11G200V01303

<b>DATOS IDENTIFICATIVOS</b>				
<b>Química inorgánica I</b>				
Asignatura	Química inorgánica I			
Código	V11G200V01404			
Titulación	Grado en Química			
Descriptores	Creditos ECTS	Seleccione	Curso	Cuatrimestre
	9	OB	2	2c
Lengua Impartición				
Departamento	Química inorgánica			
Coordinador/a	García Bugarín, Mercedes			
Profesorado	Bolaño García, Sandra Carballo Rial, Rosa Castro Fojo, Jesús Antonio García Bugarín, Mercedes Pino Cuevas, Arantxa			
Correo-e	mgarcia@uvigo.es			
Web				
Descripción general	En esta asignatura se estudia la química de los elementos de los grupos principales y sus compuestos. Se pretende dar una visión general de los diferentes tipos de comportamiento químico y de los compuestos existentes			

<b>Competencias</b>	
Código	
C1	Demostrar conocimiento y comprensión de hechos esenciales, conceptos, principios y teorías en: aspectos principales de la terminología química, nomenclatura, conversiones y unidades.
C2	Demostrar conocimiento y comprensión de hechos esenciales, conceptos, principios y teorías en: tipos de reacción química y sus principales características asociadas
C9	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
C12	Demostrar conocimiento y comprensión de hechos esenciales, conceptos, principios y teorías en: rasgos estructurales de los elementos químicos y sus compuestos, incluyendo la estereoquímica
C14	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
C20	Evaluar, interpretar y sintetizar datos e información química
C23	Presentar material y argumentos científicos de manera oral y escrita a una audiencia especializada
C25	Manejar con seguridad sustancias químicas, considerando sus propiedades físicas y químicas, incluyendo la valoración de cualquier riesgo específico asociado con su uso
C26	Realizar procedimientos habituales de laboratorio y utilizar la instrumentación en trabajo sintético y analítico
C27	Monitorizar, mediante observación y medida de propiedades físicas y químicas, sucesos o cambios y documentarlos y registrarlos de manera sistemática y fiable
C28	Interpretar datos derivados de las observaciones y mediciones del laboratorio en términos de su significado y relacionarlos con la teoría adecuada
D1	Comunicarse de forma oral y escrita en al menos una de las lenguas oficiales de la Universidad
D3	Aprender de forma autónoma
D4	Buscar y gestionar información procedente de distintas fuentes
D5	Utilizar las tecnologías de la información y de las comunicaciones y manejar herramientas informáticas básicas
D6	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
D7	Aplicar los conocimientos teóricos a la práctica
D8	Trabajar en equipo
D9	Trabajar de forma autónoma
D12	Planificar y gestionar adecuadamente el tiempo
D13	Tomar decisiones
D14	Analizar y sintetizar información y obtener conclusiones
D15	Evaluar de modo crítico y constructivo su entorno y a sí mismo

<b>Resultados de aprendizaje</b>	
Resultados previstos en la materia	Resultados de Formación y Aprendizaje

Distinguir el diferente comportamiento químico de los elementos de los grupos principales dentro de cada grupo.	C1 C2 C9	D1 D3 D4 D9
Elegir el método general más adecuado para la obtención de los elementos de los grupos principales a partir de sus compuestos presentes en la naturaleza.	C1 C2 C9	D1 D3 D4 D9
Identificar en cada grupo de elementos de los grupos principales aquellos tipos de compuestos singulares y de especial importancia por su estructura o su reactividad.	C1 C2 C9 C12 C14	D1 D3 D4 D9
Deducir las propiedades físicas de un compuesto a partir del tipo de enlace entre sus componentes y su estructura.	C9 C12 C14 C20 C23	D1 D3 D4 D9
Relacionar las propiedades físicas y químicas de los elementos de los grupos principales y de sus compuestos con sus aplicaciones.	C2 C9 C12 C14 C23	D1 D3 D4 D9
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.	C25 C26 C27 C28	D4 D5 D6 D7 D8 D9 D12 D13 D14 D15

## Contenidos

Tema	
1. Hidrógeno	Obtención. Propiedades físicas y químicas. Hidruros: clasificación y estudio general de los mismos. El agua.
2. Gases nobles	Características generales. Propiedades y usos. Fluoruros de xenón. Combinaciones de xenón con oxígeno.
3. Halógenos	Características generales. Obtención, propiedades y reactividad. Haluros. Óxidos, oxoácidos y oxosales. Compuestos interhalógenos e iones polihalogenuro. Pseudohalógenos. Fluorocarbonos.
4. Elementos del grupo 16	Características generales. Estudio específico del oxígeno. Obtención, propiedades y reactividad. Peróxido de hidrógeno. Azufre. Obtención, propiedades y reactividad. Combinaciones hidrogenadas y halogenadas del azufre. Óxidos, oxoácidos y oxosales de azufre.
5. Elementos del grupo 15	Características generales. Obtención, propiedades y reactividad. Combinaciones hidrogenadas y halogenadas. Óxidos, oxoácidos y oxosales de nitrógeno y fósforo. Arsénico y bismuto.
6. Elementos del grupo 14	Características generales. Carbono. Obtención, propiedades y reactividad. Óxidos y carbonatos. Carburos. Combinaciones halogenadas y nitrogenadas. Silicio, germanio, estaño y plomo. Obtención, propiedades y reactividad. Hidruros y haluros. Óxidos. Silicatos. Siliconas.
7. Elementos del grupo 13	Características generales. Boro. Obtención, propiedades y reactividad. Hidruros y haluros. Compuestos con nitrógeno. Óxidos, oxoácidos y oxosales. Aluminio. Obtención, propiedades y reactividad. Química en disolución acuosa del ion aluminio. Hidruros, haluros y óxidos. Compuestos más importantes de galio, indio y talio.
8. Elementos del grupo 1	Propiedades físicas y químicas. Reactividad. Obtención. Compuestos más importantes.
9. Elementos del grupo 2	Propiedades físicas y químicas. Reactividad. Obtención. Compuestos más importantes.
Práctica 1-2-3	Estudio de las propiedades químicas de los óxidos y peróxidos.
Práctica 4	Obtención y comportamiento químico de los halógenos.
Práctica 5	Obtención y reactividad de compuestos de azufre.
Práctica 6-7-8	Obtención y reactividad de compuestos del grupo 15.



**Planificación**

	Horas en clase	Horas fuera de clase	Horas totales
Sesión magistral	26	19	45
Resolución de problemas y/o ejercicios	26	22	48
Prácticas de laboratorio	45.5	5.5	51
Pruebas de respuesta corta	3	30	33
Pruebas de respuesta larga, de desarrollo	3	40	43
Pruebas prácticas, de ejecución de tareas reales y/o simuladas.	2	3	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 sobre el tema a desarrollar, haciendo especial énfasis en los aspectos más importantes o de difícil comprensión para el alumno. El profesor/a utilizará la plataforma Tem@ para dar información sobre la materia o sobre su desarrollo.
Resolución de problemas y/o ejercicios	Se dedicarán dos horas semanales para discutir y resolver cuestiones sobre la materia que previamente el alumno tendrá que trabajar.
Prácticas de laboratorio	Los experimentos se realizarán a lo largo de 13 sesiones de 3,5 horas cada una. El alumno dispondrá de los guiones de prácticas así como del material de apoyo en la plataforma tem@ con el fin de que pueda tener conocimiento previo de los experimentos a realizar. El alumno deberá elaborar el cuaderno de laboratorio durante la realización de las prácticas.

**Atención personalizada**

Metodologías	Descripción
Resolución de problemas y/o ejercicios	Se atenderán las consultas del alumnado en el horario de tutorías.

**Evaluación**

	Descripción	Calificación	Resultados de Formación y Aprendizaje
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.	15	C1 D1 C2 D3 C9 D4 C12 D6 C14 D7 C23 D9 D13
Prácticas de laboratorio	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 ( 15%). Se realizará una prueba que permitirá evaluar las competencias y destrezas adquiridas por el alumno (10%). La puntuación será considerada si en la prueba larga se alcanza un calificación igual o superior a 5 puntos sobre 10.	25	C25 D4 C26 D5 C27 D6 C28 D7 D8 D9 D12 D13 D14 D15
Pruebas de respuesta corta	Pruebas cortas sobre aspectos concretos de los contenidos explicados en clase. La puntuación será considerada si en la prueba larga se alcanza un calificación igual o superior a 5 puntos sobre 10.	20	C1 D1 C2 D6 C9 D7 C12 C14 C20
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. Será de carácter obligatorio. Para aprobar la materia, el alumno deberá alcanzar en esta prueba una calificación mínima de 5 puntos sobre 10.	40	C1 D1 C2 D6 C9 D7 C12 C14 C20

---

## Otros comentarios sobre la Evaluación

---

La asistencia a las clases teóricas, prácticas de laboratorio y seminarios es obligatoria.

La participación del alumno en alguno de los actos de evaluación de la materia implicará la condición de "presentado/a" y, por lo tanto, la asignación de una calificación. Se consideran actos de evaluación la asistencia a las clases prácticas de laboratorio (tres o más) y la realización de pruebas.

**Convocatoria de Julio.** Los alumnos que no superen la materia al final del cuatrimestre deberán hacer una prueba escrita en el periodo de cierre de evaluación en el mes de julio. Dicha prueba tendrá un valor del 40% de la nota que sustituirá los resultados de la prueba final del cuatrimestre. La calificación de resolución de problemas, prácticas de laboratorio y pruebas cortas se mantiene.

---

---

## Fuentes de información

---

ATKINS, P.; OVERTON, T.; ROURKE, J.; WELLER, M. Y ARMSTRONG, F., **Inorganic Chemistry**, Fifth Edition,

HOUSE, J. E., **Inorganic Chemistry**, 2<sup>a</sup> Ed,

HOUSECROFT, C.E. Y SHARPE, A. G., **Inorganic Chemistry**, 3<sup>a</sup> Ed,

HOUSECROFT, C. E. ; A. G. SHARPE., **Química Inorgánica**, 2.<sup>a</sup> Ed (español),

RAYNER-CANHAM, G., OVERTON, T., **Descriptive Inorganic Chemistry**, 5<sup>a</sup> Ed,

RAYNER-CANHAM, G., **Química Inorgánica Descriptiva**, 2.<sup>a</sup> Ed,

SHRIVER & ATKINS, **Química Inorgánica**, 4<sup>o</sup> ed.,

---

---

## 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

---