



## Facultade de Química

### Presentación

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



### Titulacións impartidas no centro

- Grao en Química
- Másteres e Doutoramentos:
  - Investigación Química e Química Industrial (Interuniversitario)
  - Química Teórica e Modelización Computacional (Interuniversitario)
- Máster profesionalizante:
  - Ciencia e Tecnoloxía de Conservación de Produtos da Pesca

### Servizos do centro

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

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

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

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

### Páxina web

Toda a información sobre a Facultade de Química e os títulos que se imparten atópase no enlace:

<http://quimica.uvigo.es>

## Materias

### Curso 2

Código	Nome	Cuadrimestre	Cr.totais
V11G200V01301	Física III	1c	6
V11G200V01302	Química analítica I	1c	9
V11G200V01303	Química física I	1c	6
V11G200V01304	Química orgánica I	1c	9
V11G200V01401	Ferramentas informáticas e de comunicación en química	2c	6
V11G200V01402	Métodos numéricos en química	2c	6
V11G200V01403	Química física II	2c	9
V11G200V01404	Química inorgánica I	2c	9

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

Materia	Física III			
Código	V11G200V01301			
Titulación	Grao en Química			
Descritores	Creditos ECTS	Sinale	Curso	Cuadrimestre
	6	OB	2	1c
Lingua de impartición	Castelán			
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				
Descrición xeral	A materia pretende ser unha introdución á Mecánica *Cuántica e á Mecánica Estatística, orientada ás súas aplicacións en Química.			

**Competencias**

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
C14	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: relación entre propiedades macroscópicas e propiedades de átomos e moléculas individuais, incluíndo as macromoléculas
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
C23	Presentar material e argumentos científicos de xeito oral e escrita a unha audiencia especializada
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

**Resultados de aprendizaxe**

Resultados previstos na materia	Resultados de Formación e Aprendizaxe	
Describir *unificadamente o campo electromagnético mediante as leis de *Maxwell. Aplicar as condicións básicas de fronteira no baleiro ou en presenza de medios materiais.	C3	D1 D12 D14
Derivar a ecuación de propagación dunha onda electromagnética, caracterizada a través dos seus principais características. Relacionar este concepto co espectro electromagnético.	C3	D12 D14
Explicar os fenómenos empíricos relacionados coa interacción radiación materia non explicados pola Teoría Clásica, e as solucións propostas para a súa resolución (dualidade onda *corpúsculo, *cuantización da radiación).	C3	D12 D14 D15
Enunciar os postulados da Mecánica *Cuántica e as súas consecuencias na reformulación da teoría *microscópica da Física Clásica.	C3	D1 D12 D14 D15
Explicar os fundamentos da teoría de operadores matemáticos, incluíndo os conceptos de función e valor propio, espectro, *linealidad e *hermiticidade, espazo de funcións, etc.	C3	D1 D9 D12 D14

Escribir os operadores fundamentais da Mecánica *Cuántica (posición, momento lineal e angular, *hamiltoniano de sistemas sinxelos).	C3 C19	D1 D9 D12 D14
Aplicar os conceptos previos ao estudo mecánico-*cuántico de sistemas sinxelos, como unha partícula sometida a un potencial de pozo cadrado infinito, ou a un potencial harmónico, resolvendo a ecuación de *Schrödinger independente do tempo.	C3 C19	D1 D3 D6 D8 D12 D13 D14
Calcular as funcións e valores propios do operador de momento angular.	C3 C19	D6 D12 D14
Resolver as ecuacións de onda do átomo de hidróxeno, calculando os seus orbitais.	C3 C19	D6 D8 D12 D14
Resolver a ecuación de *Schrödinger para átomos *polielectrónicos mediante métodos aproximados.	C3 C19 C20	D1 D5 D6 D9 D12 D13 D14
Explicar de forma sinxela as transicións entre estados e os espectros de emisión ou absorción resultantes.	C3 C19 C20 C22 C23	D1 D6 D8 D9 D12 D14 D15
Enunciar as leis da Mecánica Estatística que rexen o comportamento de sistemas de partículas, *particularizado á estatística de *Maxwell *Boltzmann. Derivar a función de *partición dun sistema e coñecer en detalle o seu significado físico.	C14 C20 C22 C23	D1 D4 D5 D6 D7 D8 D12 D13
Aplicar a estatística de *Maxwell *Boltzmann ao caso dos gases ideais mono e *poliatómicos para estimar propiedades termodinámicas a partir de propiedades *microscópicas como masa, xeometría molecular e frecuencias de vibración.	C14 C19	D1 D4 D5 D6 D7 D8 D12 D13

## Contidos

Tema	
Campo electromagnético: ecuacións de *Maxwell. Corrente de desprazamento	Ecuacións de *Maxwell. Enerxía Ecuación de ondas
*Cuantización da radiación. Dualidade onda-*corpúsculo	Catástrofe *ultravioleta Efecto *fotoeléctrico RAIOS X. Condición de *Bragg. Radiación de freado efecto *Compton Dualidade onda-*corpúsculo
Principios de Mecánica *Cuántica	Limitacións da Física Clásica e orixe da Mecánica *Cuántica Hipótese de De *Broglie Relación de *indeterminación Postulados da Mecánica *Cuántica *Teorema do *virial
Estudo mecano-*cuántico de sistemas modelo	Introdución. Partícula nunha caixa de potencial. *Oscilador harmónico. Momento angular e *rotor ríxido.

Métodos aproximados	Introdución. Método de variacións. Método de perturbacións.
Átomos *hidrogénicos	Introdución. Resolución da parte radial da ecuación de *Schrödinger. Orbitais *hidrogénicos. Momentos angular e magnético electrónicos. *Espín electrónico. Axuste *espín-órbita. Estrutura *hiperfina. Espectros de átomos *hidrogénicos.
Átomos *polieletrónicos	Aproximación de electróns independentes. Principio de *antisimetría. Orbitais de *Slater e funcións basee. Método *SCF-*HF. Termos e niveis electrónicos. Espectros de átomos *polieletrónicos.
Mecánica Estatística	Nomenclatura e postulados. Colectivo *canónico. Función de *partición *canónica. Sistemas de partículas non *interaccionantes. Función de *partición molecular. Función de *partición *canónica dun gas ideal puro. Lei de distribución de *Boltzmann para moléculas non *interaccionantes. Termodinámica estatística para gases ideais. Introdución ao estudo de sistemas reais.

### Planificación

	Horas na aula	Horas fóra da aula	Horas totais
Sesión maxistral	26	49.4	75.4
Resolución de problemas e/ou exercicios	26	39	65
Actividades introdutorias	1	0.6	1.6
Probas de resposta curta	4	0	4
Probas de resposta longa, de desenvolvemento	4	0	4

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

### Metodoloxía docente

	Descrición
Sesión maxistral	*Exposición dos aspectos fundamentais de cada tema e formulación daqueles que se van a abordar nos seminarios
Resolución de problemas e/ou exercicios	Resolución de problemas numéricos, cuestións teóricas e desenvolvemento dos aspectos teóricos expostos nas Clases Maxistrais coa participación do alumno.
Actividades introdutorias	Clase de presentación da materia con exposición: de partes do temario, contidos, repartición en probas curtas e exame final, normas xerais de avaliación, etc.

### Atención personalizada

Metodoloxías	Descrición
Sesión maxistral	Respostas ás preguntas relacionadas coa materia que expoñan os alumnos nas clases de resolución de problemas e en *tutorías. Os alumnos coñecerán desde principio de curso os horarios de *tutorías dos profesores da materia. Nas *tutorías os alumnos poderán revisar os seus exames
Resolución de problemas e/ou exercicios	Respostas ás preguntas relacionadas coa materia que expoñan os alumnos nas clases de resolución de problemas e en *tutorías. Os alumnos coñecerán desde principio de curso os horarios de *tutorías dos profesores da materia. Nas *tutorías os alumnos poderán revisar os seus exames

### Avaliación

Descrición	Cualificación	Resultados de Formación e Aprendizaxe

Resolución de problemas e/ou exercicios	Basicamente centrarase na resolución de exercicios na aula. No entanto, poderase *tamien pedir ao alumno que entregue exercicios propostos e que o resolva de maneira autónoma. Neste caso o profesor poderá pedir ao alumno que lle explique *individualmente como resolveu o exercicio.	15
Probas de resposta curta	Celebraranse 2 probas de resposta curta. Referiranse, respectivamente, á materia dos temas 1 a 3 e 4 a 8. A superación de cada unha delas permitirá que os alumnos poidan non volver examinarse desa materia no exame final do cuadrimestre, pero non así no exame de segunda oportunidade (xuño-xullo).	42.5
Probas de resposta longa, de desenvolvemento	Ao terminar o curso celebrarase unha proba completa na que os alumnos que o desexen poderán repetir aqueles aspectos que non superaron nas probas curtas realizadas.	42.5

### **Outros comentarios sobre a Avaliación**

Durante o curso realizaranse dúas probas curtas referidas aos temas 1-3, a primeira, e aos temas 4-8, a segunda. Ambas conterán problemas e cuestións e a súa superación liberará aos alumnos desa parte da materia. De maneira voluntaria, os alumnos poderán participar na resolución de exercicios nos seminarios ou entregar exercicios propostos. Tamén poderán presentarse a un exame final, que incluírá toda a materia, que lles permitirá aumentar a puntuación alcanzada nos parciais. Todo alumno deberá alcanzar polo menos unha cualificación de 3.5 sobre 10 no global das súas probas escritas para poder acumular a puntuación correspondente a resolución de exercicios.

Na segunda convocatoria manterase a puntuación alcanzada mediante a resolución de exercicios. Este exame valorarase de maneira semellante ao exame final.

O alumno que non se presente a ningunha proba durante o curso será cualificado en primeira convocatoria como non presentado.

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

R. Eisberg, y R. Resnick, **Física Cuántica**, 1983,  
M. Alonso y E.J. Finn, **Física**, 2000,  
I. N. Levine, **Fisicoquímica**, 2004,  
P.W. Atkins y J. de Paula, **Atkin's Physical Chemistry**, 2014,  
J. Bertrán y otros, **Química Cuántica**, 2000,  
I.N. Levine, **Química Cuántica**, 2001,

### **Recomendacións**

#### **Materias que continúan o temario**

Química física II/V11G200V01403

#### **Materias que se recomenda ter cursado previamente**

Física: Física I/V11G200V01102

Física: Física II/V11G200V01201

Matemáticas: Matemáticas I/V11G200V01104

Matemáticas: Matemáticas II/V11G200V01203

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

Materia	Química analítica I			
Código	V11G200V01302			
Titulación	Grao en Química			
Descritores	Creditos ECTS	Sinale	Curso	Cuadrimestre
	9	OB	2	1c
Lingua de impartición	Castelán Galego			
Departamento	Química analítica e alimentaria			
Coordinador/a	Pérez Cid, Benita			
Profesorado	Bendicho Hernández, José Carlos González Romero, Elisa Leao Martins, Jose Manuel Pérez Cid, Benita			
Correo-e	benita@uvigo.es			
Web				
Descrición xeral	O principal obxectivo da materia Química Analítica (I) é que o alumno alcance unha visión xeral da análise química cualitativa e cuantitativa, tanto no aspecto teórico como aplicado, o que lle servirá de base para a aprendizaxe doutras materias que se impartirán en cursos posteriores, particularmente no referente ao deseño e aplicación de métodos analíticos máis complexos. As clases de teoría complementáanse con experimentos prácticos e seminarios.			

**Competencias**

Código	
A5	Que os estudantes desenvolvan aquelas habilidades de aprendizaxe necesarias para emprender estudos posteriores cun alto grao de autonomía.
C1	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: aspectos principais da terminoloxía química, nomenclatura, conversións e unidades
C2	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: tipos de reacción química e as súas principais características asociadas
C4	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: fundamentos e ferramentas utilizadas na resolución de problemas analíticos e na caracterización de sustancias químicas
C17	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: metroloxía dos procesos químicos, incluíndo a xestión da calidade
C18	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: principios de Electroquímica
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
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 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
D16	Desenvolver un compromiso ético

**Resultados de aprendizaxe**

Resultados previstos na materia		Resultados de Formación e Aprendizaxe	
Recoñecer a importancia da Química Analítica en función dos seus obxectivos.		C4 C19	D4 D14
Identificar as etapas fundamentais do proceso analítico como metodoloxía para a resolución de problemas e seleccionar con criterio os distintos métodos de análise.	A5	C4 C19	D4 D14
Describir as propiedades analíticas básicas (exactitude, precisión, sensibilidade e selectividade) e os tipos de erros que poden afectar aos resultados experimentais.		C19 C20	D1 D4 D6 D14
Describir os aspectos básicos da mostraxe e preparación da mostra para a determinación dos seus compoñentes.		C4 C19	D1 D4 D14
Utilizar a calibración, uso e limpeza do material utilizado no laboratorio analítico.	A5	C21 C26	D7 D9 D12
Preparar disolucións de concentración exacta (patrón primario) e aproximada (patrón secundario e reactivos auxiliares) en función da súa finalidade e manexar adecuadamente as unidades de concentración.	A5	C1 C17 C21 C25	D6 D7 D9 D12 D13
Explicar e interpretar os coñecementos básicos da separación e identificación de especies químicas en disolución para a resolución dun problema analítico, utilizando unha sistemática de separación.	A5	C2 C4 C19 C21 C26	D3 D7 D9 D12 D13 D14
Describir os principios da análise química cuantitativa (volumétrica e gravimétrica) e as súas limitacións experimentais.		C2 C4 C19	D1 D14
Identificar e avaliar a posible interacción entre reaccións concorrentes acido-base, de complexación, precipitación e redox.	A5	C2 C18 C19 C20	D7 D9 D12 D14
Elaborar e interpretar curvas de valoración ácido-base, de formación de complexos, de precipitación e redox e saber seleccionar os indicadores mais adecuados.	A5	C2 C18 C19 C20	D5 D7 D9 D12 D14
Describir os fundamentos da análise gravimétrica e os factores que inflúen na pureza dos precipitados.		C2 C20	D1 D4 D14
Levar a cabo, no laboratorio, a precipitación e a separación por filtración nas determinacións graviméticas.		C2 C17 C19 C21 C25 C26 C28	D7 D8 D12
Utilizar correctamente as técnicas gravimétricas e volumétricas, incluíndo o manexo adecuado do material necesario en cada caso.	A5	C17 C19 C21 C26 C27	D7 D9 D12 D14
Manexar o cálculo sistemático na análise volumétrica (valoracións directas, por retroceso e indirectas) e gravimétrica e saber interpretar os resultados obtidos.	A5	C20 C22 C28 C29	D6 D7 D14 D15 D16

**Contidos**

Tema	
Tema 1: Química Analítica e proceso analítico.	Introdución á Química Analítica. Clasificación dos métodos de análise. O proceso analítico como metodoloxía para a resolución de problemas analíticos.



Tema 2: Avaliación dos resultados analíticos.	Propiedades analíticas. Erros en Química Analítica: clasificación. Estadística básica aplicada á expresión dos resultados. Comparación e rexeitamento de resultados. Concepto de trazabilidade.
Tema 3: Introducción á Análise Química cualitativa e cuantitativa.	Operacións previas á análise. Mostraxe e tratamento da mostra. Descomposición e disolución. Introducción ás separacións analíticas. Análise cualitativa: características das respostas binarias. Análise cuantitativa clásica e instrumental. Metodoloxías de cuantificación. Métodos calculables e relativos.
Tema 4: Análise cuantitativa volumétrica e gravimétrica.	Reaccións volumétricas. Disolucións patrón. Valoracións directas, por retroceso e indirectas. Formación, propiedades e pureza dos precipitados. Cálculos da análise gravimétrica e volumétrica.
Tema 5: Volumetrías ácido-base.	Comportamento de especies monopróticas, polipróticas e anfóteras. Curvas de valoración. Detección do punto final: indicadores ácido-base. Reactivos valorantes. Aplicacións analíticas.
Tema 6: Volumetrías de formación de complexos.	Estabilidade dos complexos. Reaccións de enmascaramento. Curvas de valoración. Detección do punto final: indicadores metalocrómicos. Aplicacións analíticas.
Tema 7: Volumetrías de precipitación.	Factores que afectan á solubilidade dos precipitados. Curvas de valoración. Detección do punto final: métodos de Mohr, Volhard e Fajans. Aplicacións analíticas.
Tema 8: Volumetrías de oxidación-redución.	Factores que modifican o potencial redox. Curvas de valoración. Detección do punto final: indicadores redox e indicadores específicos. Aplicacións analíticas.
Análise cualitativa (Laboratorio)	Separación e identificación de especies químicas. (3 sesións)  Resolución dun problema analítico mediante unha sistemática de separación. (2 sesións)
Análise gravimétrica (Laboratorio)	Determinación gravimétrica de níquel con dimetilgloxima. (1 sesión)
Volumetrías ácido-base (Laboratorio)	Determinación da acidez dunha mostra de vinagre. (1 sesión)  Determinación de ácido acetilsalicílico en analxésicos. (1 sesión)
Volumetrías de formación de complexos (Laboratorio)	Estandarización dunha disolución de Na <sub>2</sub> -AEDT con Zn (II). (1 sesión)  Determinación da dureza dunha mostra de auga. (1 sesión)
Volumetrías de precipitación (Laboratorio)	Determinación de cloruros nunha mostra de auga de mar polo método de Mohr. (1 sesión)
Volumetrías de oxidación-redución (Laboratorio)	Determinación da riqueza en osíxeno dunha mostra de H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> comercial. (1 sesión)  Determinación de cloro activo nunha mostra de lixivia. (1 sesión)

## Planificación

	Horas na aula	Horas fóra da aula	Horas totais
Sesión maxistral	26	33	59
Resolución de problemas e/ou exercicios	26	36	62
Prácticas de laboratorio	45.5	12.5	58
Informes/memorias de prácticas	0	6	6
Probas de resposta curta	4	11	15
Probas de resposta longa, de desenvolvemento	3.5	12	15.5
Probas prácticas, de execución de tarefas reais e/ou simuladas.	3.5	6	9.5

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

## Metodoloxía docente

	Descrición
Sesión maxistral	Son clases teóricas (dúas horas á semana) nas que o profesor ofrecerá unha visión global de cada un dos temas do programa incidindo, de forma especial, nos aspectos máis relevantes e naqueles que resulten de máis difícil comprensión para o alumno. As clases desenvolveranse de forma interactiva cos alumnos, comentando con eles o material on-line (dispoñible na plataforma Tem@) e a bibliografía máis adecuada para a preparación, en profundidade, de cada tema.

Resolución de problemas e/ou exercicios	Cada semana dedicaranse dúas horas á resolución de problemas e/ou exercicios propostos (seminario) que servirán para reforzar os coñecementos adquiridos nas clases teóricas. Nunhas sesións o profesor explicará aos alumnos os problemas tipo que lle permitan resolver os exercicios. En cambio, noutras sesións, serán os propios alumnos os que resolverán e explicarán no encerado os exercicios propostos nos boletíns (material on-line). Poderase solicitar aos alumnos que entreguen, de forma individual, algúns destes exercicios resoltos, que serán corrixiados polo profesor.
Prácticas de laboratorio	Realizaranse experimentos de laboratorio, de forma individual, en sesións de 3.5 h cada unha. O alumno disporá dos guións de prácticas na plataforma Tem@, a fin de que poida ter coñecemento previo dos experimentos a realizar. Durante o desenvolvemento das prácticas o alumno elaborará un caderno de laboratorio no que anotará todo o relativo ao experimento realizado (reaccións, procedementos, observacións, resultados, etc.). Poderán quedar exentos de realizar as prácticas de laboratorio aqueles alumnos que as aprobaron no curso académico 2015-16, se así o desexan. Neste caso, manterase, na parte de laboratorio, a cualificación alcanzada no seu día.

### Atención personalizada

Metodoloxías	Descrición
Prácticas de laboratorio	Tempo dedicado polo profesor para atender a tódalas dúbidas e consultas realizadas polo alumno durante o curso. Informarase do horario dispoñible para titorías na presentación da materia.
Resolución de problemas e/ou exercicios	Tempo dedicado polo profesor para atender a tódalas dúbidas e consultas realizadas polo alumno durante o curso. Informarase do horario dispoñible para titorías na presentación da materia.
Probas	Descrición
Informes/memorias de prácticas	Tempo dedicado polo profesor para atender a tódalas dúbidas e consultas realizadas polo alumno durante o curso. Informarase do horario dispoñible para titorías na presentación da materia.

### Avaliación

	Descrición	Cualificación	Resultados de Formación e Aprendizaxe
Resolución de problemas e/ou exercicios	Valorarase a resolución, por parte do alumno, dalgúns dos problemas e/ou exercicios propostos nos boletíns, que deben ser entregados ao profesor.	8	C1 D4 C2 D5 C4 D6 C18 D7 C19 D9 C22 D14
Prácticas de laboratorio	O profesor realizará un seguimento do traballo experimental realizado polo alumno nas sesións de laboratorio (competencias e destrezas adquiridas). É importante indicar que é OBRIGATORIA a asistencia a tódalas sesións de laboratorio. Se o número de ausencias é igual ou superior ao 25 % das sesións de laboratorio, suporá suspender a materia.	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 as sesións de laboratorio, o alumno elaborará un caderno no que reflecta o traballo experimental levado a cabo (reaccións, procedementos, observacións, resultados, etc.). O devandito caderno será avaliado polo profesor.	5	C20 D1 D3 D6 D9 D12 D14 D15 D16

Probas de resposta curta	Realizarase unha primeira proba curta sobre formulación de compostos químicos e cálculo de concentracións que suporá un 7 % da cualificación final.  Realizarase unha segunda proba curta correspondente aos catro primeiros temas do programa. Dita proba eliminará materia, en caso de ser aprobada e suporá un 20 % da cualificación final. Os alumnos que non a superen terán que examinarse desta parte da materia na proba final.	27	A5	C1 C2 C4 C19 C20 C22	D1 D3 D4 D5 D6 D7 D9 D12 D13 D14 D16
Probas de resposta longa, de desenvolvemento	Realizarase unha última proba escrita correspondente aos catro últimos temas do programa. Os alumnos que non superasen a proba correspondente aos catro primeiros temas terán que examinarse de toda a materia. Dita proba realizarase o día do exame final.	30	A5	C1 C2 C4 C18 C19 C20 C22	D1 D3 D4 D5 D6 D7 D9 D12 D13 D14 D16
Probas prácticas, de execución de tarefas reais e/ou simuladas.	Ao final das sesións de laboratorio, realizarase unha proba de laboratorio que permitirá avaliar as competencias e destrezas adquiridas polo alumno. É necesario superar esta proba para aprobar a parte práctica da materia.	15	A5	C28 C29	D1 D3 D6 D7 D9 D12 D13 D15 D16

### Outros comentarios sobre a Avaliación

**Primeira Convocatoria:** Para superar a materia é obrigatorio aprobar individualmente cada unha das partes: teoría e prácticas de laboratorio. Para iso, é necesario aprobar as probas escritas propostas e a proba de laboratorio. A puntuación correspondente á parte práctica da materia (laboratorio) só se computará na nota final unha vez aprobada a teoría. A participación do alumno nalgún dos actos de avaliación da materia implicará a condición de presentado e, polo tanto, a asignación dunha cualificación. Para este efecto, considéranse actos de avaliación a asistencia a clases prácticas de laboratorio (dúas ou máis) e a realización de probas escritas.

**Segunda Convocatoria:** Na convocatoria extraordinaria o alumno poderá repetir aquelas probas (teoría e/ou laboratorio) que non superase na convocatoria ordinaria. Conservaranse as puntuacións alcanzadas polo alumno, durante o curso, nas demais actividades que figuran no apartado de avaliación.

### Bibliografía. Fontes de información

- J. Guíteras, 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**, 9ª Ed., Thompson, Madrid,  
D.C. Harris, **Análisis Químico Cuantitativo**, 3ª Ed., Reverté, Barcelona,  
Gary D. Christian, **Química Analítica**, 6ª Ed., McGraw-Hill,  
D.A. Skoog, D.M. West, F.J. Holler, S.R. Crouch, **Química Analítica**, 7ª Ed., McGraw-Hill, Madrid,  
F. Burriel, S. Arribas, F. Lucena y J. Hernández, **Química Analítica Cualitativa**, 18ª Ed., Paraninfo, Madrid,  
D. Harvey, **Química Analítica Moderna**, McGraw-Hill, Madrid,  
M. Valcárcel, **Principios de Química Analítica**, Springer,  
J. A. López Cancio, **Problemas Resueltos de Química Analítica**, Thompson,  
P. Yañez-Sedeño Orive, J.M. Pingarrón Carrazón, F.J. Manuel de Villena Rueda, **Problemas Resueltos de Química Analítica**, Síntesis,  
J. N. Miller y J.C. Miller, **Estadística y Quimiometría para Química Analítica**, 4ª Ed., Prentice Hall,

### Recomendacións

#### Materias que continúan o temario

Química analítica II/V11G200V01503

Química analítica III/V11G200V01601

---

**Materias que se recomenda cursar simultaneamente**

---

Física III/V11G200V01301

Química física I/V11G200V01303

Química orgánica I/V11G200V01304

---

**Materias que se recomienda ter cursado previamente**

---

Química, física e bioloxía: Laboratorio integrado I/V11G200V01103

Química, física e xeoloxía: Laboratorio integrado II/V11G200V01202

Química: Química I/V11G200V01105

Química: Química II/V11G200V01204

---

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

Materia	Química física I			
Código	V11G200V01303			
Titulación	Grao en Química			
Descritores	Creditos ECTS	Sinale	Curso	Cuadrimestre
	6	OB	2	1c
Lingua de impartición	Castelán Galego			
Departamento	Química Física			
Coordinador/a	Hervés Beloso, Juan Pablo			
Profesorado	Hervés Beloso, Juan Pablo Mandado Alonso, Marcos			
Correo-e	jhervas@uvigo.es			
Web	<a href="http://webs.uvigo.es/qf1_web/">http://webs.uvigo.es/qf1_web/</a>			
Descrición xeral	A materia Química Física I é un dos primeiros contactos dun estudante de Química coa Química Física. Esta disciplina estuda as propiedades e o comportamento dos sistemas químicos empregando os métodos da Física. Nesta materia abórdase o tratamento macroscópico rigoroso de sistemas químicos en equilibrio, sistemas xa introducidos na materia Química I. Aproveitando o coñecemento básico dos principios da Termodinámica, aplicaranse a sistemas de interese químico para dispor dunha descrición cuantitativa dos mesmos. Para este tratamento cuantitativo é fundamental estar familiarizado co cálculo diferencial de máis dunha variable e o cálculo integral dunha variable, aspectos abordados na materia Matemáticas II. Os coñecementos sobre a descrición *macroscópica dos sistemas químicos que se alcanzarán nesta materia complementáanse cos contidos da Química Física *III do terceiro curso. A aplicación experimental destes coñecementos efectuarase na materia do segundo cuadrimestre Química Física II.			

**Competencias**

Código	
C6	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: principios de Termodinámica e as súas aplicacións en Química
C18	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: principios de Electroquímica
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
C23	Presentar material e argumentos científicos de xeito oral e escrita a unha audiencia especializada
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

**Resultados de aprendizaxe**

Resultados previstos na materia	Resultados de Formación e Aprendizaxe	
Empregar o concepto de función de estado para calcular as variacións das distintas funcións de estado termodinámicas dunha sustancia pura.	C6	D1
	C19	D3
	C20	D4
	C23	D5
		D6
		D7
		D8
		D9
		D12
		D13
		D14
		D15

Obter a *entropía dunha sustancia a partir de medidas *calorimétricas	C6 C19 C20 C23	D1 D3 D4 D5 D6 D7 D8 D9 D12 D13 D14 D15
Establecer se un proceso que sofre unha sustancia pura é espontáneo ou non a partir do cálculo das variacións das propiedades termodinámicas	C6 C19 C20 C23	D1 D3 D4 D5 D6 D7 D8 D9 D12 D13 D14 D15
Manexar táboas termodinámicas para obter valores das distintas funcións de estado termodinámicas de reacción e calcular as funcións termodinámicas de reacción a temperaturas distintas	C6 C19 C20 C23	D1 D3 D4 D5 D6 D7 D8 D9 D12 D13 D14 D15
Calcular a función fugacidade para un gas real a partir da súa ecuación de estado ou ben a partir de medidas experimentais	C6 C19 C20 C23	D1 D3 D4 D5 D6 D7 D8 D9 D12 D13 D14 D15
Calcular a constante termodinámica de reaccións en disolución, a partir das concentracións das especies ou a partir das funcións termodinámicas	C6 C19 C20 C23	D1 D3 D4 D5 D6 D7 D8 D9 D12 D13 D14 D15

Calcular as características termodinámicas dun cambio de fase, e saber o intervalo de aplicabilidade das ecuacións empregadas	C6 C19 C20 C23	D1 D3 D4 D5 D6 D7 D8 D9 D12 D13 D14 D15
Calcular as propiedades termodinámicas dunha disolución ideal a partir da súa composición	C6 C19 C20 C23	D1 D3 D4 D5 D6 D7 D8 D9 D12 D13 D14 D15
Calcular as propiedades *coligativas dunha disolución a partir da concentración do *solute e as propiedades do disolvente. Establecer cando estes resultados se poden aplicar a un caso real	C6 C19 C20 C23	D1 D3 D4 D5 D6 D7 D8 D9 D12 D13 D14 D15
Calcular as actividades e coeficientes de actividade de disolucións non *electrolíticas e empregar o modelo adecuado para o cálculo do coeficiente de actividade *iónico medio. Obter este coeficiente a partir de medidas experimentais	C6 C18 C19 C20 C23	D1 D3 D4 D5 D6 D7 D8 D9 D12 D13 D14 D15
Empregar medidas experimentais procedentes das células *galvánicas para determinar funcións de estado de reacción	C6 C18 C19 C20 C23	D1 D3 D4 D5 D6 D7 D8 D9 D12 D13 D14 D15

Determinar a actividade e/ou o coeficiente de actividade *iónico medio dun *electrolito mediante medidas experimentais de *FEM de células *galvánicas	C6 C18 C19 C20 C23	D1 D3 D4 D5 D6 D7 D8 D9 D12 D13 D14 D15
Analizar a importancia da interfase e dos distintos fenómenos asociados a ela nos procesos termodinámicos dos sistemas materiais	C6 C19 C20 C23	D1 D3 D4 D5 D6 D7 D8 D9 D12 D13 D14 D15
Establecer a importancia da tensión superficial e os distintos procesos asociados en función da natureza do sistema	C6 C19 C20 C23	D1 D3 D4 D5 D6 D7 D8 D9 D12 D13 D14 D15
Diferenciar entre procesos de absorción física e química e describir os modelos empregados para a súa descrición	C6 C19 C20 C23	D1 D3 D4 D5 D6 D7 D8 D9 D12 D13 D14 D15

## Contidos

Tema	
Principios da termodinámica na química.	Primeiro principio da Termodinámica. Enerxía interna. *Entalpía. Capacidades *caloríficas. *Termoquímica. Segundo principio da termodinámica. *Entropía. Interpretación molecular da *entropía. Terceiro principio da Termodinámica. Cálculo das variacións de *entropía.
Funcións termodinámicas	Ecuacións de *Gibbs. Relacións de *Maxwell. Cálculo de variacións das funcións de estado. Sistemas abertos. Magnitudes molares parciais. Potencial químico. Potencial químico dun gas ideal. Potencial químico nunha mestura de gases ideais. Potencial químico dos gases reais. Fugacidade.
Equilibrio químico entre gases.	Condicións de equilibrio termodinámico. Grado de avance. Equilibrio en reaccións en fase gasosa. Constante de equilibrio termodinámica en reaccións en fase gasosa. Influencia da temperatura na constante de equilibrio. Factores que afectan á posición do equilibrio: principio de Le Châtelier.



Equilibrio de fases en sistemas dun compoñente.	Conceptos de compoñente, fase e grao de *liberdade. Condicións de equilibrio entre fases. Regra das fases. Cambios de fase de primeira orde. Ecuacións de *Clapeyron e *Clausius-*Clapeyron. Cambios de fase de orde superior.
Disolucións ideais.	Volumes molares parciais. Ecuación de *Gibbs-*Duhem. Disolución ideal: Lei de *Raoult. *Diagramas *P.*x e *T.*x. Disolución *diluída ideal: Lei de Henry. Propiedades *coligativas.
Disolucións non ideais.	Desviacións da lei de *Raoult. Actividade e coeficiente de actividade. Coeficientes de actividade nas escalas de *molalidad e *molaridad. Disolucións de *electrolitos. Teoría de *Debye-*Hückel.
Equilibrios químicos en disolución.	Constante de equilibrio termodinámica en reaccións en disolución. Equilibrios acedo-base. Produto de *solubilidade. Efectos *salinos. Sistemas *electroquímicos. Células *galvánicas e *electrolíticas. Medida da forza *electromotriz dunha célula *galvánica. Ecuación de *Nernst. Potencial de eléctrodo.
Termodinámica de superficies.	Superficies e interfases. Tensión superficial. Fenómenos derivados da tensión superficial. Absorción. *Fisorción e *quimisorción. *Isotermas.

### Planificación

	Horas na aula	Horas fóra da aula	Horas totais
Sesión maxistral	26	31	57
Seminarios	26	38	64
Resolución de problemas e/ou exercicios	0	14	14
Probas de autoavaliación	0	10	10
Probas de resposta curta	2	0	2
Probas de resposta longa, de desenvolvemento	3	0	3

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

### Metodoloxía docente

	Descrición
Sesión maxistral	Consistirán na exposición breve por parte do profesor dos aspectos fundamentais de cada tema, tomando como base o material dispoñible na plataforma TEMA. Tamén se exporán problemas numéricos que axuden a comprender e asentir conceptos.
Seminarios	As clases de seminario dedicaranse á resolución de problemas e profundarase sobre os aspectos que presenten maiores dificultades aos alumnos. Estas clases serán principalmente labor *do alumno, baixo a supervisión do profesor.

### Atención personalizada

Probas	Descrición
Probas de autoavaliación	Os alumnos resolverán de forma autónoma cuestionarios tipo test a través da plataforma Tema e serán titorizados individualmente polo profesor.
Resolución de problemas e/ou exercicios	Os alumnos resolverán de forma autónoma problemas propostos e serán titorizados individualmente polo profesor.

### Avaliación

	Descrición	Cualificación	Resultados de Formación e Aprendizaxe	
Resolución de problemas e/ou exercicios	Problemas propostos para cada tema da materia.	Hasta un 7,5	C6 C18 C19 C20 C23	D1 D3 D4 D6 D7 D8 D9 D12 D13 D14 D15

Probas de autoavaliación	Probas tipo test na plataforma TEMA.	Hasta un 7,5	C6 C18 C19 C20	D3 D4 D5 D7 D9 D12 D13 D14 D15
Probas de resposta curta	Probas escritas curtas sobre certas partes da materia.	Hasta un 20	C6 C18 C19 C20	D1 D3 D4 D6 D7 D9 D12 D13 D14 D15
Probas de resposta longa, de desenvolvemento	*Exame escrito sobre todo-los contidos da materia.	Mínimo un 65	C6 C18 C19 C20	D1 D3 D4 D6 D7 D9 D12 D13 D14

### Outros comentarios sobre a Avaliación

- O traballo voluntario do alumno (tests autoevaluables + problemas propostos) poderán constituír ata o 15% da cualificación final sempre que o alumno realice, polo menos, a metade das actividades que se propoñan ao longo do curso.

- Realizaranse unha proba escrita curta (de dúas horas de duración) da primeira metade da materia. Esta proba pode eliminar a materia. A realización de desta proba é a condición mínima para que a materia sexa cualificada en acta. Esta proba curta poderá supor ata un 20% da cualificación final.

-Realizarase unha proba escrita global ao final de cuadrimestre (ao redor de tres horas de duración) sobre a totalidade dos contidos da materia. Esta proba global suporá polo menos un 65% da cualificación final. No caso de que o alumno superara a proba curta ( $\geq 5$ ) poderá optar na proba escrita global entre examinarse soamente da segunda metade da materia ou da totalidade da asignatura. No primeiro caso, a nota do da proba global fará media coa proba curta.

IMPORTANTE: Para superar a materia en acta é requisito imprescindible alcanzar na proba global unha nota mínima de 4 puntos sobre 10.

- Nas seguintes convocatorias da materia respectaranse as porcentaxes anteriores e manteranse as cualificacións obtidas no traballo voluntario e na proba curta realizada durante o curso, excepto no caso de cambio de profesor, quen será o que estableza novas normas.

### Bibliografía. Fontes de información

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

Atkins, **Química Física**, Panamerica, 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,

### Recomendacións

#### Materias que continúan o temario

Química física II/V11G200V01403

**Materias que se recomienda ter cursado previamente**

---

Matemáticas: Matemáticas II/V11G200V01203

Química: Química I/V11G200V01105

Química: Química II/V11G200V01204

---

<b>DATOS IDENTIFICATIVOS</b>				
<b>Química orgánica I</b>				
Materia	Química orgánica I			
Código	V11G200V01304			
Titulación	Grao en Química			
Descritores	Creditos ECTS	Sinale	Curso	Cuadrimestre
	9	OB	2	1c
Lingua de impartición	Castelán Galego			
Departamento	Química orgánica			
Coordinador/a	Iglesias Antelo, María Beatriz			
Profesorado	Cid Fernández, María Magdalena Iglesias Antelo, María Beatriz Muñoz López, Luis Terán Moldes, María del Carmen			
Correo-e	bantelo@uvigo.es			
Web				
Descrición xeral	Nesta materia preténdese dar ao alumnado 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, levarase a cabo o estudo detallado da reactividade dos grupos funcionais con enlace múltiple carbono-carbono, incluíndo os compostos aromáticos, e carbono-osíxeno.			

<b>Competencias</b>	
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 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
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

<b>Resultados de aprendizaxe</b>	
Resultados previstos na materia	Resultados de Formación e Aprendizaxe

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. Estereoisomería configuracional	Grupos funcionais. Representación tridimensional de estruturas orgánicas. Configuración absoluta de centros estereoxénicos, compostos cíclicos e alquenos.
Tema 2. Reactividade dos compostos orgánicos	Reactividade ácido-base de compostos orgánicos. Mecanismos de reacción: reaccións por pasos. Perfil enerxético dunha reacción. Rotura heterolítica de enlaces. Reaccións iónicas. Intermedios de reacción: carbanións. Reactividade redox de compostos orgánicos. Estados formais de oxidación.
Tema 3. Reaccións de adición a enlaces múltiples carbono-carbono	Estrutura e reactividade xeral dos grupos funcionais con enlaces múltiples carbono-carbono: alquenos e alquinos. Hidroxenación: calores de hidroxenación e estabilidade de alquenos e dienos; rotura homolítica de enlaces; reaccións concertadas. Reaccións de adición electrófila a alquenos. Adición de HX; intermedios de reacción: carbocatións; rexioselectividade; electrófilos e nucleófilos. Reaccións de hidratación; orientación e estereoquímica. Adición de halóxenos (X <sub>2</sub> ). Reaccións de dihidroxilación. Reaccións de adición a alquinos.
Tema 4. Reaccións de substitución aromática	Estrutura e reactividade xeral dos compostos aromáticos. Mecanismo xeral da substitución electrófila aromática. Reaccións con electrófilos non carbonados. Reaccións con electrófilos carbonados. Reaccións de substitución electrófila aromática en sistemas substituídos: orientación e reactividade. Modulación da reactividade de aneis aromáticos. Reaccións de substitución nucleófila aromática.
Tema 5. Reaccións de adición nucleófila a grupos carbonilo	Estrutura e reactividade xeral do grupo carbonilo (aldehidos e cetonas). Mecanismo xeral da adición nucleófila. Adicións nucleófilas non reversibles: adición de compostos organometálicos (alquinos, organolíticos e magnesianos); adición de carbanións estabilizados; adición de hidruro. Adicións nucleófilas 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. Reactividade relativa dos derivados de ácido: basicidade e electrofilia. Reaccións non reversibles de adición-eliminación: grupo saínte. Reaccións reversibles de adición-eliminación: catálise básica e catálise ácida. Reaccións con auga e alcois; reaccións con amoníaco e aminas. Estrutura e reactividade de nitrilos. Reaccións de nitrilos.
Práctica 1	Separación de mesturas de compostos orgánicos mediante dúas técnicas: extracción ácido-base (líquido-líquido) e cromatografía en columna. Catro sesións.

Práctica 2	Adición electrófila a un dobre enlace. Unha sesión.
Práctica 3	Substitución electrófila aromática. Unha sesión.
Práctica 4	Reducción dunha cetona. Unha sesión.
Práctica 5	Preparación dunha hidrazona. Unha sesión.
Práctica 6	Hidrólise dun éster. Unha sesión.
Práctica 7	Proxecto de síntese. Catro sesións.

### Planificación

	Horas na aula	Horas fóra da aula	Horas totais
Sesión maxistral	26	26	52
Resolución de problemas e/ou exercicios	26	49	75
Prácticas de laboratorio	45.5	9.5	55
Traballos e proxectos	0	9	9
Probas de resposta curta	10	24	34

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

### Metodoloxía docente

	Descrición
Sesión maxistral	Exposición por parte do profesorado 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 profesorado facilitará, a través da plataforma Tema, o material necesario para a realización do traballo persoal do estudante. Este deberá traballar previamente o material entregado e consultar a bibliografía recomendada para completar a información, coa finalidade de seguir as explicacións dos contidos do programa con maior aproveitamento.
Resolución de problemas e/ou exercicios	Cada semana dedicaranse dúas horas a discutir os aspectos máis destacados dos temas tratados, a resolver cuestións xurdidas no desenvolvemento dos mesmos e á resolución dos exercicios propostos.
Prácticas de laboratorio	Realizaranse experimentos de laboratorio, de xeito individual, en sesións de 3.5 h. O alumnado atopará, con antelación, na plataforma Tema, o material necesario para a preparación previa dos experimentos a realizar. Ao inicio de cada sesión o profesor fará unha exposición dos contidos a desenvolver. 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 da sesión deberá contestar a cuestións relacionadas co traballo realizado.

### Atención personalizada

Metodoloxías	Descrición
Resolución de problemas e/ou exercicios	O profesorado atenderá as consultas do estudantado relacionadas co estudo dos temas vinculados á materia e coas actividades desenvolvidas na mesma. Os horarios de atención a estudantes do profesorado da materia estarán dispoñibles na páxina web da Facultade de Química ( <a href="http://quimica.uvigo.es/profesorado.php">http://quimica.uvigo.es/profesorado.php</a> ).
Probas	Descrición
Traballos e proxectos	O profesorado titorizará ao estudantado na elaboración e realización dun pequeno proxecto de laboratorio.

### Avaliación

	Descrición	Cualificación	Resultados de Formación e Aprendizaxe
Resolución de problemas e/ou exercicios	Valorarase a participación en clase e a resolución por parte do estudante de todos os problemas e/ou exercicios propostos en tempo/condicións establecidas polo profesorado.	25	C2 D1 C10 D4 C11 D7 C12 D8 C13 D9 C19 D14 C20
Prácticas de laboratorio	A asistencia ás clases prácticas é obrigatoria. O seguimento do traballo de laboratorio será avaliado como APTO/NON APTO. Neste apartado incluíranse os seguintes aspectos: fichas previas, desenvolvemento do traballo experimental, caderno de laboratorio, cuestións. Para superar a materia é imprescindible ser avaliado como APTO.	0	C21 D12 C25 D13 C26 D14 C27 D15 C28

Traballos e proxectos	O estudante elaborará un informe previo á realización dun pequeno proxecto no laboratorio na última semana de prácticas.	15	C20 C23 C25	D1 D4 D5 D9 D14
Probas de resposta curta	Primeira proba: 15%. Abarcará o contido correspondente aos tres primeiros temas.  Segunda proba: 15%. Abarcará o contido correspondente aos tres últimos temas.  Proba escrita da parte experimental: 15%. A realizar polo alumnado que teña acadado a mención de APTO no seguimento do traballo de laboratorio. Nesta proba avaliarase a adquisición, por parte do alumnado, de competencias e destrezas relacionadas cos aspectos experimentais da materia.  Proba global: 15%. Nesta proba avaliarase a adquisición, por parte do alumnado, de competencias e destrezas relacionadas cos aspectos teóricos da materia.	60	C2 C10 C11 C12 C13 C19	D3 D7 D12 D14

## Outros comentarios sobre a Avaliación

### Para superar a materia en xaneiro será necesario:

- Acadar mención de **APTO** na avaliación do traballo de laboratorio.
- Acadar unha cualificación **mínima de 3 puntos sobre 10** en cada unha das dúas probas curtas teóricas (primeira proba e segunda proba) e na proba escrita da parte experimental.
- Acadar unha cualificación **mínima de 4 puntos sobre 10** na proba global.

Se non se cumpre algunha das condicións anteriores, a cualificación que figurará na acta será a cualificación ponderada do apartado de probas.

- Acadar unha puntuación mínima de 5.0 na suma ponderada de todos os apartados (resolución de problemas e/ou exercicios, probas de resposta curta, traballos e proxectos).

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 a clases prácticas de laboratorio (25% ou mais) ou a entrega de traballos/exercicios encargados polo profesorado (25% ou mais) ou a realización de algunha proba.

**Alumnado de 2ª e posteriores matrículas.** A aqueles estudantes que aprobaron as prácticas de laboratorio nos cursos 2014-15 ou 2015-16 outorgaráselles mención de APTO no seguimento do traballo de laboratorio no curso académico 2016-17, non sendo necesaria a realización do traballo experimental novamente. Con todo, deberán realizar o informe do proxecto (15%) e a proba escrita da parte experimental (15%) para conseguir a cualificación correspondente á parte experimental da materia no curso académico 2016-17.

## AVALIACIÓN EN XULLO

Poderá recuperarse o 45% do apartado Probas de resposta curta, do seguinte xeito:

- **Probas (30%).** Realizarase unha proba global na que se avaliarán as competencias adquiridas nos aspectos teóricos da materia. Deberá acadarse unha cualificación **mínima de 4 puntos sobre 10** para que se teña en conta o resultado desta proba na cualificación global da materia. Este resultado substituirá ás dúas peores cualificacións das tres probas teóricas realizadas durante o cuadrimestre (primeira proba, segunda proba e proba global), conservándose a cualificación mais alta das tres, sempre que supere o mínimo esixido.
- **Proba escrita da parte experimental (15%).** Deberá acadarse unha cualificación **mínima de 3 puntos sobre 10**. A nova cualificación substituirá á acadada na proba escrita da parte experimental de fin de cuadrimestre.

A cualificación final será a suma ponderada de todos os apartados (resolución de problemas e/ou exercicios, probas de resposta curta, traballos e proxectos), sempre que se superen os mínimos esixidos. De non ser o caso, a cualificación que figurará na acta será a cualificación ponderada do apartado de probas. No caso de que esta cualificación sexa inferior á obtida na avaliación de fin de cuadrimestre, a cualificación que figurará na acta será esta última.



---

**Bibliografía. Fuentes de información**

---

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

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

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

---

**Bibliografía complementaria**

- CAREY, F. *Química Orgánica*, 6ª edición en español, McGraw-Hill Interamericana, 2006.
- CLAYDEN, J.; GREEVES, N.; WARREN, S. *Organic Chemistry*, 2ª edición, Oxford University Press, 2012.
- YURKANIS BRUICE, P. *Fundamentos de Química Orgánica*, 3ª edición, Pearson, 2015.
- 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.; RIGUERA, R. *Cuestiones y ejercicios de Química Orgánica*, 2ª edición, McGraw-Hill Interamericana, 2004.
- QUIÑOÁ, E.; RIGUERA, R. *Nomenclatura y representación de los compuestos orgánicos*, 2ª edición, McGraw-Hill Interamericana, 2005.

---

**Recomendaciones**

---

**Materias que continúan o temario**

---

Química orgánica II/V11G200V01504

Química orgánica III/V11G200V01704

---

**Materias que se recomienda cursar simultaneamente**

---

Física III/V11G200V01301

Química analítica I/V11G200V01302

Química física I/V11G200V01303

---

**Materias que se recomienda ter cursado previamente**

---

Biología: Biología/V11G200V01101

Química, física e biología: Laboratorio integrado I/V11G200V01103

Química, física e xeología: Laboratorio integrado II/V11G200V01202

Química: Química I/V11G200V01105

Química: Química II/V11G200V01204

---

**DATOS IDENTIFICATIVOS****Ferramentas informáticas e de comunicación en química**

Materia	Ferramentas informáticas e de comunicación en química			
Código	V11G200V01401			
Titulación	Grao en Química			
Descritores	Creditos ECTS	Sinale	Curso	Cuadrimestre
	6	OB	2	2c
Lingua de impartición	Inglés			
Departamento	Química Física Química orgánica			
Coordinador/a	Correa Duarte, Miguel Ángel			
Profesorado	Correa Duarte, Miguel Ángel Pérez Juste, Jorge Silva López, Carlos			
Correo-e	macorrea@uvigo.es			
Web				
Descrición xeral	Este curso pretende familiarizar aos estudantes co uso de fontes de información química (científica e técnica en xeral) con énfase no seu uso a través de Internet, así como co uso de todos os tipos de ferramentas de software para cálculos estatísticos e modelización química. Prestarase atención tamén á adquisición de importantes habilidades de comunicación (a través da escritura de documentos científicos e técnicos, académicos, deseño de web, etc).			

**Competencias**

Código	
C20	Avaliar, interpretar e sintetizar datos e información química
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
D1	Comunicarse de forma oral e escrita en polo menos unha das linguas oficiais da Universidade
D2	Comunicarse a nivel básico en inglés no ámbito da Química
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
D8	Traballar en equipo
D9	Traballar de forma autónoma
D10	Traballar nun contexto tanto nacional como internacional
D14	Analizar e sintetizar información e obter conclusións
D15	Avaliar de modo crítico e construtivo o entorno e a si mesmo
D16	Desenvolver un compromiso ético
D18	Xerar novas ideas e demostrar iniciativa

**Resultados de aprendizaxe**

Resultados previstos na materia	Resultados de Formación e Aprendizaxe	
(*)Distinguir e manexar as distintas fontes de información científica e técnica (libros, revistas, resumos, bases de datos, páxinas web, patentes, etc.).	C23	D1 D2 D4 D5 D9 D14 D16
(*) Diferenciar e clasificar as revistas científicas e as contribucións ás mesmas, en función da súa temática, obxectivos e alcance.		D2 D4 D5 D8 D9 D14

(*) Buscar e assimilar información rápida e eficazmente.	C23	D1 D2 D3 D5 D8 D9 D10 D15 D18
(*) Ordenar e sintetizar a información para transmitila eficazmente.	C23	D1 D2 D5 D8 D10 D16
(*) Argumentar os propios puntos de vista mostrando sentido crítico.	C23	D1 D2 D5 D8 D10 D16
(*) Estructurar e elaborar documentos escritos sinxelos para a difusión de coñecementos e resultados científicos e técnicos (*p.ex. artigos, informes, traballos).	C23	D1 D2 D5 D8 D10 D16
(*) Manexar de modo adecuado e con espírito crítico a rede ("internet") como fonte de información.	C22	D3 D5 D9 D14 D16
(*) Realizar presentacións orais sintéticas e claras sobre temas relacionados coa Química, utilizando medios audiovisuais adecuados.	C23	D1 D2 D14 D18
(*) Organizar a propia bibliografía, con ou sen axuda de xestores bibliográficos.	C20	D3 D4 D5 D9 D14 D15
(*) Utilizar programas informáticos para a elaboración de figuras e gráficos.	C22	D4 D5 D9
(*) Comprender os principios básicos e utilidade dos programas de simulación de procesos químicos.	C22	D5 D9 D14
(*) Comprender e explicar textos en inglés relacionados coa Química.	C23	D1 D2 D3 D8
(*) Redactar documentos sinxelos e realizar presentacións orais curtas en inglés, sobre temas relacionados coa Química.	C23	D1 D2 D3 D8 D14
(*) Identificar os programas máis importantes de modelización molecular, sabendo valorar a validez e aplicación dos resultados obtidos.	C20	D3 D4 D14

## Contidos

### Tema

(\*)The scientific literature: sources of information (\*)Structure and classification of the literature.  
 General rules of a literature search  
 Function, organization and use of a scientific library

(\*)Information Sources

(\*)Books  
Journals  
Technical reports  
Conference Proceedings  
Patents  
Thesis  
Government Publications  
Standards  
Videos  
Dictionaries  
Directories  
Encyclopaedias  
Databases

(\*)Using Internet

(\*)Basic services offered by the Internet  
Remote connection and file transfer  
Search engines  
Electronic lists and subscription services  
Other services.  
Structure, function and design of web pages

(\*)Indexing and abstracting services

(\*)Identification of a scientific paper  
The ISI Web of Knowledge (WOK)  
The Chemical Abstract Service (CAS) and the Scifinder.  
Other abstracting services  
Handbooks

(\*)Bibliographic Managers

(\*)Classification References  
Use of popular software packages: Refworks, Mendeley and Endnote as examples.

(\*)Preparation of a scientific, technical or academic document

(\*)Parts of a scientific document  
References, tables and figures : general principles.  
Use of computer templates.

### Planificación

	Horas na aula	Horas fóra da aula	Horas totais
Sesión maxistral	14	28	42
Prácticas en aulas de informática	26	52	78
Resolución de problemas e/ou exercicios	2	22	24
Probas de resposta longa, de desenvolvemento	1.5	4.5	6

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

### Metodoloxía docente

	Descrición
Sesión maxistral	Explicación dos contidos correspondentes ao tema.
Prácticas en aulas de informática	Prácticas consistentes en: realización de búsquedas bibliográficas, uso de gestores bibliográficos, uso de paquetes estadísticos.
Resolución de problemas e/ou exercicios	Aplicación dos coñecementos adquiridos nas prácticas realizadas.

### Atención personalizada

Metodoloxías	Descrición
Prácticas en aulas de informática	
Resolución de problemas e/ou exercicios	

### Avaliación

Descrición	Cualificación	Resultados de Formación e Aprendizaxe
------------	---------------	---------------------------------------

Prácticas en aulas de informática	Aplicación práctica dos conceptos aprendidos nas sesións maxistráis.	20	C22 C23	D1 D2 D3 D4 D5 D9 D15 D16
Resolución de problemas e/ou exercicios	Posta en práctica dos coñecementos adquiridos mediante a resolución de exercicios.	40	C22 C23	D1 D2 D3 D4 D5 D8 D10 D14 D15 D18
Probas de resposta longa, de desenvolvemento	Proba escrita	40		D1 D2 D14 D15

### Outros comentarios sobre a Avaliación

Asistencia a clases prácticas (seminarios) é forzoso. O estudante será evaluado de (0-10) sempre e cando atendera a 3 ou máis sesións de seminario, entregou polo menos dous informes nos exercicios ou as prácticas propostas polo profesor, ou fixo un exame escrito.

Se o estudante falla na primeira chamada terá que mellorar algúns dos exercicios ou facer uns novos proporcionados polo profesor. Ademais terá que facer un exame máis minucioso, o cal ponderará o 40% do grao final.

### Bibliografía. Fontes de información

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

Kaplan, S.M., **The English-Spanish Spanish-English dictionary of chemistry**, 2ª,

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

### Recomendacións

#### Materias que se recomenda cursar simultaneamente

Métodos numéricos en química/V11G200V01402

Química física II/V11G200V01403

Química inorgánica I/V11G200V01404

#### Materias que se recomenda ter cursado previamente

Física: Física I/V11G200V01102

Física: Física II/V11G200V01201

Química: Química I/V11G200V01105

Química: Química II/V11G200V01204

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

Materia	Métodos numéricos en química			
Código	V11G200V01402			
Titulación	Grao en Química			
Descritores	Creditos ECTS	Sinale	Curso	Cuadrimestre
	6	OB	2	2c
Lingua de impartición	Galego			
Departamento	Matemáticas Química analítica e alimentaria Química Física			
Coordinador/a	Besada Morais, Manuel			
Profesorado	Besada Morais, Manuel Hermida Ramón, José Manuel Leao Martins, Jose Manuel			
Correo-e	mbesada@uvigo.es			
Web				
Descrición xeral	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	
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
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
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 na materia	Resultados de Formación e Aprendizaxe		
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.	A3 A5	C19 C22 C29	D3 D4 D5 D6 D7 D9 D12 D13 D14

Utilizar polinomios que se axustan a varios puntos do plano.

A3 C19 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. A3 C19 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. A3 C19 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 na aula	Horas fóra da aula	Horas totais
Sesión maxistral	13	26	39
Prácticas en aulas de informática	26	52	78
Probas de tipo test	4	12	16
Resolución de problemas e/ou exercicios	2	8	10
Traballos e proxectos	0	7	7

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

## Metodoloxía docente

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

## Atención personalizada

Metodoloxías	Descrición
Prácticas en aulas de informática	Os alumnos traballarán de xeito autónomo coa supervisión permanente do profesor

<b>Avaliación</b>				
	Descrición	Cualificación	Resultados de Formación e Aprendizaxe	
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 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 C22 C29	D6
Resolución de problemas e/ou exercicios	Ó finalizar o curso realizarase unha proba práctica resolvendo algúns exercicios prácticos na aula de informática	30	C19 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 C22 C29	D6

### **Outros comentarios sobre a Avaliación**

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**

#### **Materias que se recomenda ter cursado previamente**

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



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

Materia	Química física II			
Código	V11G200V01403			
Titulación	Grao en Química			
Descritores	Creditos ECTS	Sinale	Curso	Cuadrimestre
	9	OB	2	2c
Lingua de impartición	Castelán Galego			
Departamento	Química Física			
Coordinador/a	Mosquera Castro, Ricardo Antonio			
Profesorado	Graña Rodríguez, Ana María Hermida Ramón, José Manuel Mosquera Castro, Ricardo Antonio Pastoriza Santos, Isabel Peña Gallego, María de los Ángeles Pérez Juste, Ignacio			
Correo-e	mosquera@uvigo.es			
Web				
Descrición xeral	Aplicación dos principios e métodos da Mecánica Cuántica ao estudo da estrutura molecular e a espectroscopía.			

**Competencias**

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

**Resultados de aprendizaxe**

Resultados previstos na materia	Resultados de Formación e Aprendizaxe
---------------------------------	---------------------------------------

Formular hamiltonianos moleculares, utilizar sobre eles a aproximación de Born-Oppenheimer e discutir as súas consecuencias.	C3	D1
	C20	D3
	C22	D4
	C23	D5
		D6
		D7
		D9
		D12
		D13
		D14
Manexar superficies e perfís de enerxía potencial e os conceptos relativos a elas.	C3	D1
	C19	D3
	C20	D4
	C22	D5
	C28	D6
	C29	D7
		D9
	D12	
	D13	
	D14	
Aplicar os métodos OM e EV para a descrición da ligazón química en sistemas simples e coñecer (coa súa orixe) as limitacións destes métodos.	C3	D1
	C8	D3
	C19	D4
	C20	D5
	C21	D6
	C22	D7
	C23	D9
	C27	D12
	C28	D13
	C29	D14
	D15	
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, *DFT, post-*HF).	C3	D1
	C19	D3
	C20	D4
	C22	D5
	C23	D6
	C28	D7
	C29	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 ensanche das liñas *espectrales 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 flexible 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 e *fotoelectrónicos, 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 e representalos nun *diagrama de *Jablonski.	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 axustes presentes nos espectros de *RMN.	C8 C19 C22	D1 D3 D4 D6 D9
Describir as peculiaridades instrumentais das técnicas *espectroscópicas nas diferentes rexións *espectrais, así como os fundamentos e aplicacións do láser e das técnicas baseadas na transformada de *Fourier.	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

Introdución á teoría de grupos de simetría en química	- Elementos e operacións de simetría. - Grupos puntuais de simetría. - Representacións matriciais. - Representacións irreducibles. Táboas de caracteres. - Aplicacións químicas.
Aspectos cualitativos da estrutura electrónica molecular.	- Aproximación de Born-Oppenheimer. - Molécula H <sub>2</sub> <sup>+</sup> . - Método OM para moléculas diatómicas homo e heteronucleares. - Método OM en moléculas poliatómicas. - Método EV.
Tratamentos cuantitativos para o estudo da estrutura electrónica molecular.	- Método Hartree-Fock. - Métodos post-Hartree-Fock. - Métodos semiempíricos. - Cálculo de propiedades moleculares

Introdución á Espectroscopia Molecular.	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Interacción radiación-materia. Formulación xeral.</li> <li>- Integral momento dipolar de transición. Regras de selección.</li> <li>- Intensidade e posición das transicións espectrais.</li> <li>- Instrumentación.</li> </ul>
Espectroscopia de Rotación.	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Espectros de rotación pura de moléculas diatómicas. Modelos do rotor ríxido e elástico.</li> <li>- Espectros de rotación pura de moléculas poliatómicas.</li> <li>- Espectros Raman de rotación pura.</li> <li>- Instrumentación e aplicacións.</li> </ul>
Espectroscopia de Vibración-rotación.	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Espectros de vibración-rotación de moléculas diatómicas. Modelos do oscilador harmónico e anarmónico con rotación dependente da vibración.</li> <li>- Espectros de vibración-rotación de moléculas poliatómicas.</li> <li>- Espectroscopia Raman de vibración-rotación.</li> <li>- Instrumentación e aplicacións.</li> </ul>
Espectroscopia Electrónica.	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Estados electrónicos das moléculas.</li> <li>- Estrutura de vibración-rotación. Principio de Franck-Condon.</li> <li>- Grupos cromóforos e auxocromos.</li> <li>- Procesos de desactivación electrónica.</li> <li>- Instrumentación e aplicacións.</li> <li>- Láseres.</li> <li>- Espectroscopia fotoelectrónica e relacionadas.</li> </ul>
Espectroscopias de Resonancia.	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Introdución á resonancia magnética.</li> <li>- Desprazamento químico.</li> <li>- Interacción espín-espín. Constante de acoplamento.</li> <li>- Espectroscopia de resonancia de espín electrónico.</li> </ul>
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 computacional da estrutura electrónica de diferentes moléculas</li> <li>- Estudo computacional de isomería conformacional.</li> <li>- Estudo computacional de procesos químicos simples.</li> <li>- Predición, 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 na aula	Horas fóra da aula	Horas totais
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

\*Os datos que aparecen na táboa de planificación son de carácter orientador, considerando a heteroxeneidade do 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 maneira 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	<p>Realización baixo a supervisión do profesor pero de maneira autónoma, de prácticas de laboratorio ou de química computacional.</p> <p>As ditas prácticas realizaranse por parellas e en sesións de 3,5 horas.</p> <p>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.</p> <p>Ao finalizar as prácticas, e dentro do prazo que fixe o profesor, será necesario entregar o correspondente informe, elaborado seguindo as directrices dadas polo profesor.</p>
Resolución de problemas e/ou exercicios de forma autónoma	<p>Para cada un dos temas, proporanse determinados "Problemas Avaliables" ou outros traballos que o alumno deberá resolver ou realizar para entregar ao profesor no prazo que se fixe.</p>

### 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 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).
Resolución de problemas e/ou exercicios de forma autónoma	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).
Probas	Descrición
Probas de resposta longa, de desenvolvemento	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).
Informes/memorias de prácticas	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).
Probas de resposta curta	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).
Probas de tipo test	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).
Probas prácticas, de execución de tarefas reais e/ou simuladas.	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).

### Avaliación

Descrición	Cualificación	Resultados de Formación e Aprendizaxe
------------	---------------	---------------------------------------

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 10,0	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	Para cada un dos temas ou grupos de temas, proporanse determinados "Problemas Avaliables" ou outros traballos que o alumno deberá resolver ou realizar.	ata 3,75	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 escritura global ao final do cuadrimestre, na data fixada pola Xunta de Facultade.	como mínimo 52,5	C3 C8 C19 C20 C22	D1 D3 D6 D9 D12 D14 D15
Informes/memorias de prácticas	Realizarase o informe dunha práctica proposta polos profesores que se deberá presentar coidando 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. Ademais avaliaranse todas as prácticas realizadas mediante cuestións orais que os alumnos poderán responder á vista do seu caderno de laboratorio.	ata 5,0	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 de carácter non liberatorio.	hasta 15	C3 C8 C19 C20 C22	D1 D3 D6 D9 D12 D14 D15
Probas de tipo test	Ao finalizar cada tema ou grupo de temas o alumno terá, a través da plataforma TEM@, a posibilidade de responder un "test de autoavaliación" autocorrexible.	ata 3,75	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 adquirir durante o desenvolvemento das sesións de prácticas. As preguntas situaranse, nalgúns casos, no contexto dalgúns 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 10,0	C3 C6 C8 C19 C21 C22 C28 C29	D1 D3 D4 D6 D7 D9 D12 D13 D14 D15

### Outros comentarios sobre a Avaliación

A avaliación do curso terá en conta os aspectos mencionados mais arriba, distinguindo entre a parte teórica e a parte práctica da materia.

**Parte Teórica:** A súa avaliación suporá, no seu conxunto (probas curtas (20%), proba longa (70%), resolución de

problemas/traballos (5%), test de autoavaliación (5%)), un 75% da cualificación final da materia.

É requisito imprescindible para superar a materia obter na proba larga unha cualificación mínima de 4,0 sobre 10,0 puntos. No caso de non alcanzar dita puntuación a cualificación que se reflectirá na acta será unicamente a cualificación deste exame, non contabilizándose ningún dos demais apartados.

Ademais, será necesario obter unha media de 3,0 nas cuestións indicadas como teóricas nos exames (probas curtas e longa). Se non se alcanzase esta puntuación a nota reflectida na acta non poderá superar 4,0.

**Parte Práctica:** A súa avaliación contribuirá, no seu conxunto (prácticas de laboratorio (40%), informes e cuestións orais(20%) e proba escrita de prácticas (40%)), un 25% á cualificación final da materia.

É requisito imprescindible para superar a materia obter na parte práctica unha cualificación mínima de 5,0 sobre 10 puntos. No caso de non alcanzar dita puntuación a cualificación que se reflectirá na acta non poderá superar 4,0.

A asistencia ás sesións prácticas é obrigatoria (admitiranse ausencias a sesións debidamente xustificadas) e, por tanto, non é posible aprobar a materia no caso de non realizalas.

**Condición de presentado/non presentado:** 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, por 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 do 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**

ATKINS, P. W.; DE PAULA, J., **Química Física**, 8ª 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,

---

#### **Bibliografía Complementaria:**

□ ATKINS P. W., FRIEDMAN R.S., "Molecular Quantum Mechanics" (5ª Edición). Oxford University Press. (2011).

□ LEVINE I.N., "Química Cuántica" (5ª ed.), Prentice Hall (2001).

□ LEVINE I.N., "Quantum Chemistry" (7ª ed.), Pearson (2014).

□ LEVINE I.N., "Fisicoquímica" (5ª ed.), McGraw Hill (2004).

□ REQUENA A., ZÚÑIGA J., "Espectroscopía", Pearson Prentice Hall (2004).

#### **Libros de problemas:**

□ CARBALLEIRA OCAÑA L., PÉREZ JUSTE I., "Problemas de Espectroscopía Molecular", Netbiblo (2008).

□ LEVINE I.N., "Problemas de Fisicoquímica" (5ª ed.), McGraw Hill (2005).

#### **Libros de prácticas:**

□ GARLAND C.W., NIBLER J.W., SHOEMAKER D.P., "Experiments in Physical Chemistry" (7ª ed.), McGraw-Hill (2003).

□ FORESMAN J.B., FRISH A., "Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods: a guide to using Gaussian" (2ª ed.), Gaussian Inc (1996).

---

#### **Recomendacións**

##### **Materias que se recomenda cursar simultaneamente**

Ferramentas informáticas e de comunicación en química/V11G200V01401

Métodos numéricos en química/V11G200V01402

Química inorgánica I/V11G200V01404

---

**Materias que se recomienda ter 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>				
Materia	Química inorgánica I			
Código	V11G200V01404			
Titulación	Grao en Química			
Descritores	Creditos ECTS	Sinale	Curso	Cuadrimestre
	9	OB	2	2c
Lingua de impartición	Castelán			
Departamento	Química inorgánica			
Coordinador/a	García Bugarín, Mercedes			
Profesorado	Bolaño García, Sandra Carballo Rial, Rosa Couce Fortúnez, María Delfina García Bugarín, Mercedes			
Correo-e	mgarcia@uvigo.es			
Web				
Descrición xeral	"Traducción automática castelán-->galego da guía docente orixinal" Nesta materia estúdase a química dos elementos dos grupos principais e os seus compostos. Preténdese dar unha visión xeral dos diferentes tipos de comportamento químico e dos compostos existentes.			

<b>Competencias</b>	
Código	
C1	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: aspectos principais da terminoloxía química, nomenclatura, conversións e unidades
C2	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: tipos de reacción química e as súas principais características asociadas
C9	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: propiedades características dos elementos e os seus compostos, incluíndo as relacións entre grupos e as súas variacións na táboa periódica
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
C14	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: relación entre propiedades macroscópicas e propiedades de átomos e moléculas individuais, incluíndo as macromoléculas
C20	Avaliar, interpretar e sintetizar datos e información química
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
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>	
Resultados previstos na materia	Resultados de Formación e Aprendizaxe
Distinguir o diferente comportamento químico dos elementos dos grupos principais dentro de cada grupo.	C1 D1 C2 D3 C9 D4 D9

Elixir o método xeral máis adecuado para a obtención dos elementos dos grupos principais a partir dos seus compostos presentes na natureza.	C1 C2 C9	D1 D3 D4 D9
Identificar en cada grupo de elementos dos grupos principais aqueles tipos de compostos singulares e de especial importancia pola súa estrutura ou a súa reactividad.	C1 C2 C9 C12 C14	D1 D3 D4 D9
Deducir as propiedades físicas dun composto a partir do tipo de ligazón entre os seus compoñentes e a súa estrutura.	C9 C12 C14 C20 C23	D1 D3 D4 D9
Relacionar as propiedades físicas e químicas dos elementos dos grupos principais e dos seus compostos coas súas aplicacións.	C2 C9 C12 C14 C23	D1 D3 D4 D9
Levar a cabo no laboratorio a preparación e o estudo dalgunhas propiedades físicas e químicas de elementos dos grupos principais e dos seus compostos.	C25 C26 C27 C28	D4 D5 D6 D7 D8 D9 D12 D13 D14 D15

## Contidos

Tema	
1. Hidróxeno	Obtención. Propiedades físicas e químicas. *Hidruros: clasificación e estudo xeral dos mesmos. A auga.
2. Gases nobres	Características xerais. Propiedades e usos. *Fluoruros de *xenón. Combinacións de *xenón con osíxeno.
3. *Halóxenos	Características xerais. Obtención, propiedades e *reactividad. *Haluros. Óxidos, *oxoácidos e *oxosales. Compostos *interhalóxenos e ións *polihalóxeno. *Pseudohalóxenos. *Fluorocarbonos.
4. Elementos do grupo 16	Características xerais. Estudo específico do osíxeno. Obtención, propiedades e *reactividad. *Peróxido de hidróxeno. Xofre. Obtención, propiedades e *reactividad. Combinacións *hidrogenadas e *halogenadas do xofre. Óxidos, *oxoácidos e *oxosales de xofre.
5. Elementos do grupo 15	Características xerais. Obtención, propiedades e *reactividad. Combinacións *hidrogenadas e *halogenadas. Óxidos, *oxoácidos e *oxosales de nitróxeno e fósforo. *Arsénico e *bismuto.
6. Elementos do grupo 14	Características xerais. Carbono. Obtención, propiedades e *reactividad. Óxidos e *carbonatos. *Carburos. Combinacións *halogenadas e *nitrogenadas. Silicio, *germanio, estaño e chumbo. Obtención, propiedades e *reactividad. *Hidruros e *haluros. Óxidos. *Silicatos. Siliconas.
7. Elementos do grupo 13	Características xerais. *Boro. Obtención, propiedades e *reactividad. *Hidruros e *haluros. Compostos con nitróxeno. Óxidos, *oxoácidos e *oxosales. Aluminio. Obtención, propiedades e *reactividad. Química en disolución *acuosa do ión aluminio. *Hidruros, *haluros e óxidos. Compostos máis importantes de *galio, indio e *talio.
8. Elementos do grupo 1	Propiedades físicas e químicas. *Reactividad. Obtención. Compostos máis importantes.
9. Elementos do grupo 2	Propiedades físicas e químicas. *Reactividad. Obtención. Compostos máis importantes.
Práctica 1-2	Estudo das propiedades químicas dos óxidos.
Práctica 3-4	Obtención e comportamento químico dos *halóxenos.
Práctica 4-5	Obtención e *reactividad de compostos do grupo 16.
Práctica 6-7-8	Obtención e *reactividad de compostos do grupo 15.
Práctica 9-10	Obtención e *reactividad de compostos do grupo 14.
Práctica 11-12	Obtención e *reactividad de compostos do grupo 13.

<b>Planificación</b>			
	Horas na aula	Horas fóra da aula	Horas totais
Sesión maxistral	26	15	41
Resolución de problemas e/ou exercicios	26	20	46
Prácticas de laboratorio	45.5	5.5	51
Probas de resposta longa, de desenvolvemento	4	70	74
Probas prácticas, de execución de tarefas reais e/ou simuladas.	3	10	13

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

<b>Metodoloxía docente</b>	
	Descrición
Sesión maxistral	Exposición por parte do profesor sobre o tema a desenvolver, facendo especial énfasis nos aspectos máis importantes ou de difícil comprensión para o alumno. O profesor/a utilizará a plataforma *Tem@ para dar información sobre a materia ou sobre o seu desenvolvemento.
Resolución de problemas e/ou exercicios	Dedicaranse dúas horas semanais para discutir e resolver cuestións sobre a materia que previamente o alumno terá que traballar.
Prácticas de laboratorio	Os experimentos realizaranse ao longo de 13 sesións de 3,5 horas cada unha. O alumno disporá dos guións de prácticas así como do material de apoio na plataforma Tem@ co fin de que poida ter coñecemento previo dos experimentos a realizar. O alumno deberá elaborar o caderno de laboratorio durante a realización das prácticas.

<b>Atención personalizada</b>	
Metodoloxías	Descrición
Resolución de problemas e/ou exercicios	

<b>Avaliación</b>				
	Descrición	Cualificación	Resultados de Formación e Aprendizaxe	
Resolución de problemas e/ou exercicios	Valorarase a resolución por parte do alumno dunha serie de problemas e/ou exercicios propostos no tempo/condicións establecido/as polo profesor. A puntuación será considerada se en cada unha de próbalas eliminatorias alcánzase unha cualificación igual ou superior a 5 puntos sobre 10.	15	C1 C2 C9 C12 C14 C23	D1 D3 D4 D6 D7 D9 D13
Prácticas de laboratorio	É obrigatoria a asistencia ás sesións de laboratorio. O profesor realizará un seguimento do traballo experimental realizado polo alumno nas sesións de laboratorio, así como do caderno elaborado ( 10%). Realizarase unha proba que permitirá avaliar as competencias e destrezas adquiridas polo alumno (15%). A puntuación será considerada se en cada unha de próbalas eliminatorias alcánzase unha cualificación igual ou superior a 5 puntos sobre 10.	25	C25 C26 C27 C28	D4 D5 D6 D7 D8 D9 D12 D13 D14 D15
Probas de resposta longa, de desenvolvemento	2 Probas sobre aspectos concretos dos contidos explicados en clase e seminarios. Cada proba poderá ser eliminatoria cando o alumno alcance unha cualificación mínima de 5 puntos sobre 10. Para poder aprobar a materia, o alumno deberá alcanzar en cada unha de próbalas eliminatorias unha cualificación mínima de 5 puntos sobre 10.	60	C1 C2 C9 C12 C14 C20	D1 D6 D7

### **Outros comentarios sobre a Avaliación**

A asistencia ás clases teóricas, prácticas de laboratorio e seminarios é obrigatoria.

A participación do alumno nalgún dos actos de avaliación da materia implicará a condición de [presentado/a] e, por tanto, a asignación dunha cualificación. Considéranse actos de avaliación a asistencia ás clases prácticas de laboratorio (tres ou máis) e a realización de probas.

Os alumnos poderán realizar unha Proba Final, que poderá ter un valor de ata un 60 %, na data de peche de avaliación da

convocatoria de maio-xuño cando requiran:

- Superar algunha de próbalas eliminatorias.
- Subir a nota de próbalas eliminatorias que lle permita alcanzar os mínimos requiridos para aprobar a materia.
- Subir a nota en próbalas eliminatorias para mellorar a nota final da materia.

Convocatoria de Xullo.

Os alumnos que non superen a materia ao final do cuadrimestre deberán facer unha proba escrita no período de peche de avaliación da convocatoria de xullo. Dita proba substituirá os resultados de próbalas eliminatorias realizadas ao longo do cuadrimestre e terá un valor de ata un 60 %. A cualificación de resolución de problemas e prácticas de laboratorio obtida a ao longo do cuadrimestre mantense.

---

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

ATKINS, P.; OVERTON, T.; ROURKE, J.; WELLER, M. Y ARMSTRONG, F., **Inorganic Chemistry**, Fifth Edition,  
HOUSE, J. E., **Inorganic Chemistry**, 2ª Ed,  
HOUSECROFT, C.E. Y SHARPE, A. G., **Inorganic Chemistry**, 3ª Ed,  
HOUSECROFT, C. E. ; A. G. SHARPE., **Química Inorgánica**, 2.ª Ed (español),  
RAYNER-CANHAM, G., OVERTON, T., **Descriptive Inorganic Chemistry**, 5ª Ed,  
RAYNER-CANHAM, G., **Química Inorgánica Descriptiva**, 2.ª Ed,  
SHRIVER & ATKINS, **Química Inorgánica**, 4ª ed.,

---

---

### **Recomendacións**

#### **Materias que se recomenda cursar simultaneamente**

Ferramentas informáticas e de comunicación en química/V11G200V01401  
Métodos numéricos en química/V11G200V01402  
Química física II/V11G200V01403

---

#### **Materias que se recomenda ter cursado previamente**

Química, física e bioloxía: Laboratorio integrado I/V11G200V01103  
Química, física e xeoloxía: Laboratorio integrado II/V11G200V01202  
Química: Química I/V11G200V01105  
Química: Química II/V11G200V01204

---