



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 3

Código	Nome	Cuadrimestre	Cr.totais
V11G201V01301	Enxeñaría química	1c	6
V11G201V01302	Química analítica III: Métodos eletroanalíticos e separacións	1c	6
V11G201V01303	Química física III: Química cuántica	1c	6
V11G201V01304	Química inorgánica III: Química de coordinación	1c	6
V11G201V01305	Química orgánica III: Reaccións concertadas, radicalarias e fotoquímicas	1c	6
V11G201V01306	Química analítica IV: Métodos cromatográficos e afíns	2c	6
V11G201V01307	Química física IV: Estrutura molecular y espectroscopia	2c	6
V11G201V01308	Química física V: Cinética química	2c	6
V11G201V01309	Química inorgánica IV: Metais de transición e estado sólido	2c	6
V11G201V01310	Química orgánica IV: Deseño da síntese orgánica	2c	6

DATOS IDENTIFICATIVOS				
Enxeñaría química				
Materia	Enxeñaría química			
Código	V11G201V01301			
Titulación	Grao en Química			
Descritores	Creditos ECTS	Sinale	Curso	Cuadrimestre
	6	OB	3	1c
Lingua de impartición	#EnglishFriendly Castelán			
Departamento	Enxeñaría química			
Coordinador/a	González de Prado, Begoña			
Profesorado	González de Prado, Begoña			
Correo-e	bgp@uvigo.es			
Web				
Descrición xeral	Esta materia, de 3er curso do grao en Química, é unha introdución a Enxeñaría Química na que se relaciona os coñecementos adquiridos no grao de química cos procesos realizados na industria química. O obxectivo primordial é que o alumno adquiera os coñecementos básicos en balances de materia e enerxía e aplique os seus coñecementos ao deseño de operacións de separación como a destilación ou a extracción líquido-líquido. Esta materia serve de base para comprender os contidos doutras materias como Química Ambiental, Química Alimentaria e Química Industrial. Materia do programa English Friendly. Os/ as estudantes internacionais poderán solicitar ao profesorado: a) materiais e referencias bibliográficas para o seguimento da materia en inglés, b) atender as titorías en inglés, c) probas e avaliacións en inglés			

Resultados de Formación e Aprendizaxe

Código	
A1	Que os estudantes saiban aplicar os seus coñecementos ó seu traballo ou vocación dunha forma profesional e posúan as competencias que adoitan demostrarse por medio da elaboración e defensa de argumentos e a resolución de problemas dentro da súa área de estudo
B4	Capacidade de análise e síntese
C3	Recoñecer e analizar problemas químicos, cualitativos e cuantitativos, presentando estratexias para solucionarlos a través da avaliación, interpretación e síntese de datos e información química
C23	Coñecer os principios e procedementos na enxeñaría química
D1	Capacidade para resolver problemas

Resultados previstos na materia

Resultados previstos na materia	Resultados de Formación e Aprendizaxe			
Coñecer e identificar as diversas operacións de separación e os seus campos de aplicación.	A1	B4	C3 C23	D1
Elaborar e interpretar diagramas de equilibrio líquido-vapor, líquido- líquido e líquido-gas	A1	B4	C3 C23	D1
Deseñar as diferentes operacións de separación baseadas en equilibrio líquido-vapor, líquido-líquido e líquido-gas.	A1		C23	D1
Deseñar reactores químicos ideais.	A1		C3 C23	D1

Contidos

Tema	
Tema 1. Introducción á Enxeñaría Química	Orixe, concepto e evolución da Enxeñaría Química. Operación descontinua, continua e semicontinua. Estado estacionario e non estacionario. Operación en corrente directa e contracorrente. Clasificación das operacións unitarias. Sistemas de unidades.
Tema 2. Balances de materia e enerxía	Ecuación xeral de balance. Balances de materia en sistemas sen reacción química en estado estacionario e non estacionario. Recirculación, purga e by-pass. Balances de materia en sistemas con reacción química en réxime estacionario. Ecuación xeral de balance de enerxía. Balances de enerxía en sistemas con reacción química en réxime estacionario.
Tema 3. Destilación	Equilibrio líquido-vapor. Diagramas de fases para mesturas binarias. Destilación simple: destilación flash e destilación diferencial. Rectificación.

Tema 4. Extracción líquido-líquido	Equilibrio líquido-líquido de sistemas binarios e ternarios: curva binodal e rectas de repartición. Extracción líquido-líquido en contacto directo. Extracción líquido-líquido en contracorriente.
Tema 5. Reactores químicos	Velocidade de reacción. Reactores ideais: reactor descontinuo de mestura completa, reactor continuo de mestura completa e reactor continuo de fluxo en pistón.
Tema 6. Transmisión de calor	Mecanismos de transmisión de calor. Conducción de calor a través de paredes planas, cilíndricas e esféricas. Intercambiadores de calor.

Planificación			
	Horas na aula	Horas fóra da aula	Horas totais
Lección maxistral	12	25	37
Resolución de problemas	20	25	45
Aprendizaxe colaborativa	2	0	2
Resolución de problemas de forma autónoma	0	11	11
Estudo de casos	0	20	20
Exame de preguntas obxectivas	2	19	21
Resolución de problemas e/ou exercicios	2	12	14

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

Metodoloxía docente	
	Descrición
Lección maxistral	Son clases teóricas (unha hora semanal) nas que o profesor exporá os aspectos máis relevantes de cada tema tomando como base a documentación dispoñible na plataforma Moovi.
Resolución de problemas	Para cada tema porase a disposición dos alumnos un boletín de problemas. Algúns destes problemas resolveranse en clase e outros os terán que resolver os alumnos de forma individual e entregalos para que sexan corrixis polo profesor
Aprendizaxe colaborativa	Nalgunhas clases de resolución de problemas proporase algún problema para que o resolvan en grupos reducidos.
Resolución de problemas de forma autónoma	Para cada tema porase a disposición dos alumnos problemas e/ou actividades que terán que resolver de forma individual e entregalos para que sexan corrixis polo profesor a través da plataforma *Moovi
Estudo de casos	Proporase un problema global que abarque a maior parte dos contidos da materia que terán que resolver de forma individual e entregar a través da plataforma Moovi para a súa avaliación

Atención personalizada	
Metodoloxías	Descrición
Resolución de problemas	Nas horas de tutoría asignadas o profesor resolverá as dúbidas con respecto á materia.
Aprendizaxe colaborativa	Durante as sesións de aprendizaxe colaborativo o profesorado resolverá as dúbidas que poidan xurdir
Resolución de problemas de forma autónoma	Nas horas de tutoría asignadas o profesor resolverá as dúbidas con respecto á materia.
Estudo de casos	Nas horas de tutoría asignadas o profesor resolverá as dúbidas con respecto á materia.

Avaliación		Cualificación Resultados de Formación e Aprendizaxe			
	Descrición				
Aprendizaxe colaborativa	Resolución de exercicios en grupos pequenos	5	B4	C3 C23	D1
Resolución de problemas de forma autónoma	Os alumnos deberán entregar, nos prazos indicados, os problemas e actividades propostos de cada tema.	10	B4	C3 C23	D1
Estudo de casos	Proporase un problema global que abarque a maior parte dos contidos da materia	15	A1	C3 C23	D1
Exame de preguntas obxectivas	Realizarase unha proba longa de toda a materia da materia.	40	A1	B4 C3 C23	D1
Resolución de problemas e/ou exercicios	Realizaranse dúas probas curtas, unha dos temas 1 e 2 e outra dos temas 3 e 4.	30	A1	B4 C3 C23	D1

Outros comentarios sobre a Avaliación

Realizaranse dúas probas escritas curtas ao longo do cuadrimestre que non eliminan materia. Na data fixada polo centro avaliarase a totalidade da materia e é necesario alcanzar un mínimo de 3 sobre 10 puntos para ter en conta os demais elementos de avaliación. En caso de non alcanzar a nota mínima, será a nota da proba final a que conste como cualificación da materia.

As distintas actividades realizadas na aula e de maneira autónoma polo alumnado supoñen no seu conxunto o 30% da nota final. Para superar a materia é imprescindible ter unha nota mínima de 3,5 sobre 10 puntos nestes apartados (aprendizaxe colaborativo, resolución de problemas de forma autónoma, estudo de casos).

A participación do estudante nalgunha das probas de avaliación, a entrega do 20% ou máis dos traballos encargados polo profesor, implica a condición de presentado/a e a asignación dunha cualificación.

Segunda oportunidade. Realizarase unha proba longa de toda a materia que suporá o 70% da nota. Manteranse as notas correspondentes ás actividades realizadas na aula e de maneira autónoma obtidas, polo alumnado, ao longo do curso

Bibliografía. Fontes de información

Bibliografía Básica

G. Calleja, F. García, A. de Lucas, D. Prats, J.M. Rodriguez, **Introducción a la Ingeniería Química**, Síntesis, 1999

D.M. Himmelblau,, **Principios Básicos y Cálculos en Ingeniería Química**, Prentice-Hall, 2002

C.J. GEANKOPLIS, **Procesos de transporte y principios de procesos de separación**, CECSA, 2006

W.L. McCabe, J.C. Smith, P. Harriot, **Operaciones Unitarias en Ingeniería Química**, McGraw-Hill, 2002

Bibliografía Complementaria

C.J. King, **Procesos de Separación**, Reverté, 1986

H.S. Fogler, **Elementos de Ingeniería de la Reacción Química**, Prentice-Hall, 2001

R.M. Felder, R.W. Rousseau, **Principios elementales de los procesos químicos**, Limusa,

Recomendacións

DATOS IDENTIFICATIVOS				
Química analítica III: Métodos eletroanalíticos e separacións				
Materia	Química analítica III: Métodos eletroanalíticos e separacións			
Código	V11G201V01302			
Titulación	Grao en Química			
Descritores	Creditos ECTS	Sinale	Curso	Cuadrimestre
	6	OB	3	1c
Lingua de impartición	#EnglishFriendly Castelán Galego Inglés			
Departamento	Química analítica e alimentaria			
Coordinador/a	González Romero, Elisa			
Profesorado	Costas Rodríguez, Marta González Romero, Elisa			
Correo-e	eromero@uvigo.es			
Web				
Descrición xeral	Dar coñecemento da análise de compostos (orgánicos e *inorgánicos, *iones, átomos e moléculas) de interese ambiental, clínico, biomédico, na industria alimentaria e farmacéutica, en laboratorios de control de calidade, *etc, mediante as principais Técnicas *Electrométricas de análises e dos métodos de Separación Clásicos para a preparación da mostra. Dentro do proceso/procedemento analítico, teranse en conta as condicións para a medida directa e aquelas outras situacións nas que sería necesaria a separación previa do *analito e/ou *interferentes da matriz (tratamento de mostra). Darase unha visión ampla e actual da versatilidade destas técnicas como ferramenta para resolver problemas nas áreas de aplicación mencionadas, xa sexa levado a cabo a análise nos laboratorios químicos (implica transporte e almacenaxe da mostra) ou directamente no lugar de recollida de mostra (análise □in situ□ ou descentralizado), debido ás súas vantaxes de *miniaturización e, por tanto, de *portabilidade, o seu fácil manexo e a súa rapidez de resposta (métodos de *cribado). Con todo iso, preténdese que o estudante poida adquirir a suficiente destreza, en primeiro lugar, no manexo das fontes de documentación bibliográfica e, en segundo lugar, na posta en marcha e mantemento de equipos, de forma que poida aplicar a metodoloxía analítica na resolución de problemas reais. Materia do programa *English *Friendly: os/*as estudantes internacionais poderán seguir as clases sen dificultade pois, tanto o material visual (presentacións en *PowerPoint) como a bibliografía recomendada, preséntase en inglés, ademais de ter á súa disposición outro material de apoio para o seguimento da materia en inglés e de poder solicitar ao profesorado calquera outro material ou referencias bibliográficas adicionais nese idioma. Atenderanse as intervencións en clase, as *tutorías e a realización das probas e avaliacións tamén en inglés. Materia Ofertada para o Programa de Maiores; aos estudantes deste programa que cursen esta materia, facilitaráselles material de apoio en español (libros de texto, *monografías, artigos, *etc) para que poidan seguir con fluidez os contidos, ademais de dispor da bibliografía recomendada.			

Resultados de Formación e Aprendizaxe	
Código	
A1	Que os estudantes saiban aplicar os seus coñecementos ó seu traballo ou vocación dunha forma profesional e posúan as competencias que adoitan demostrarse por medio da elaboración e defensa de argumentos e a resolución de problemas dentro da súa área de estudo
A3	Que os estudantes teñan a capacidade de reunir e interpretar datos relevantes (normalmente dentro da súa área de estudo) para emitir xuízos que inclúan unha reflexión sobre temas relevantes de índole social, científica ou ética
B5	Capacidade de adaptarse a novas situacións e adoptar decisións
C6	Coñecer os fundamentos e ferramentas habituais na resolución de problemas analíticos e na caracterización de substancias químicas
C13	Coñecer os principios e aplicacións da electroquímica
C26	Levar a cabo correctamente procedementos habituais no laboratorio, incluíndo o uso de instrumentación química estándar para o traballo sintético e analítico
D1	Capacidade para resolver problemas

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

Identificar e distinguir correctamente as diferentes etapas do proceso analítico	A3			D1
Coñecer e aplicar os principais sistemas de toma, conservación e tratamento de mostra con fins *electroanalíticos	A1	C13		D1
Describir e explicar os fundamentos e aplicacións analíticas das técnicas de separación non *cromatográficas no tratamento de mostra e do *electroanálisis na determinación	A3	C13		D1
Adquirir xuízo crítico para avaliar e seleccionar a técnica idónea, tanto *electroanalítica como de separación, para resolver un problema analítico real, tendo en conta ao *analito, ao tipo de mostra e a calidade analítica que se esixe aos resultados.	A1	B5	C13 C26	D1
Diferenciar, elixir e manexar correctamente a *instrumentación implicada no *electroanálisis e o material utilizado nas separacións non *cromatográficas	A1	B5	C13 C26	D1
Adquirir habilidades para planificar e desenvolver un método de análise, así como para calibrar, medir e interpretar os resultados obtidos ao resolver, de forma experimental, o problema analítico que se propoña e avaliar/defender con éxito calquera situación, simulada ou real, que xurda no laboratorio.	A3	B5	C26	D1
Adquirir habilidades para discutir e defender a elección dun método de análise en situacións diferentes e a súa *validación.	A3	B5	C13 C26	D1
Realizar correctamente os cálculos na preparación de disolucións, na *calibración e na avaliación dos resultados e recoñecer erros.	A1 A3	B5	C6 C26	D1
Recompilar información para elaborar, argumentar e presentar informes.	A1	B5		D1
Manipular de forma correcta sustancias químicas, valorar riscos e xestionar os seus residuos.	A3	B5		D1

Contidos

Tema	
TEMA 1.- O *electroanálisis na medida. Fundamentos dos métodos *electrométricos.	Reaccións químicas *redox e *electroquímicas. *Interfase *electrodo/disolución. *Fenómenos de transporte. Electrólise e modelo de difusión *estacionario. Clasificación das técnicas *electrométricas. *Instrumentación: compoñentes básicos en sistemas *potenciométricos, *conductimétricos e *potenciostáticos/*galvanostáticos.
TEMA 2.- *Electrodos e células.	*Electrodos de traballo, referencia e auxiliares. Tipos de *electrodo de traballo: *ISE, *ISFET, sólidos (metálicos e carbono), líquidos (*Hg), *serigrafiados (*SPE) e modificados. Disolventes e *electrólitos soporte. Configuración de células en *electroanálisis e circuíto equivalente. *Calibración, o papel do branco en *electroanálisis e cálculo de parámetros analíticos. Medida directa e medida previo tratamento da mostra: separación e *derivatización en *electroanálisis. *Validación.
TEMA 3.- *Conductimetría e *potenciometría.	Análise *conductimétrica. Análise *potenciométrico. Valoracións *conductimétricas e *potenciométricas. Aplicacións analíticas.
TEMA 4.- *Electroanálisis en sistemas dinámicos *I.	*Coulombimetría, *cronocoulombimetría e valoracións *coulombimétricas. Aplicacións analíticas. *Cronoamperometría e *amperometría. *Voltamperometría de varrido lineal (*LSV) e cíclica (CV). Procesos de *electrodo para compostos orgánicos e *inorgánicos e criterios. Aplicacións analíticas.
TEMA 5.- *Electroanálisis en sistemas dinámicos *II.	Técnicas *impulsionales: *voltamperometría normal de pulsos (*NPV), diferencial de pulsos (*DPV), onda cadrada (*SWV). Técnicas de corrente alterna (AC). Técnicas de *redisolución. Técnicas *híbridas e axustes. Aplicacións analíticas. Reflexións e estudo comparativo con outras técnicas analíticas.
TEMA 6.- Fundamento e obxectivos das separacións en química analítica.	O proceso analítico: Tratamento de mostra e medida. Fundamento e obxectivos das separacións en química analítica. Tratamento de mostra por dixestión. Preparación da mostra: purificación e *preconcentración. Estudos de recuperación.
TEMA 7.- Separacións non *cromatográficas.	Precipitación, *Lixiviación, *Volatilización e Destilación (*liofilización, *Kjeldhal, *Willard-*Winter), *Electrodeposición e *redisolución.
TEMA 8.- Extracción	Extracción líquido-líquido, Extracción *S-*L (*Soxhlet, Extracción asistida por *Ultrasonidos, microondas e acelerada-AGARRA), *microextracción e extracción en fase sólida (*SPE).
PRÁCTICAS DE LABORATORIO	Experimentos relacionados cos contidos en *electroanálisis e separacións, aplicando o proceso analítico e incluíndo a avaliación e tratamento de datos, así como a entrega de informes.

Planificación

	Horas na aula	Horas fóra da aula	Horas totais
Lección maxistral	24	18	42
Seminario	12	4	16
Prácticas de laboratorio	26	14	40
Obradoiro	0	6	6

Exame de preguntas obxectivas	1	8	9
Exame de preguntas de desenvolvemento	2	12	14
Informe de prácticas, prácticum e prácticas externas	0	12	12
Práctica de laboratorio	1	10	11

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

Metodoloxía docente

	Descrición
Lección maxistral	As clases maxistrais (55 *min) pretenden dar unha visión global e real do *electroanálisis, tanto de compostos orgánicos como *inorgánicos, por medida directa ou previa separación do *analito. Cada un dos temas irá documentado con artigos científicos, cuxos contidos servirán para asentir e ampliar os coñecementos adquiridos nas clases teóricas, e con exemplos representativos dos conceptos fundamentais que se recollen en cada tema. A metodoloxía ensino-aprendizaxe estará centrada no alumno, polo que as clases estarán dirixidas a motivar/incentivar unha participación elevada por parte destes na aula. Por iso, as clases desenvolveranse de forma moi interactiva cos alumnos, utilizando para o desenvolvemento das mesmas o material didáctico en liña, así como a bibliografía máis adecuada. O uso dos Tics (*MooVi e O meu *Moodle) será o recurso que permita ao alumno a comunicación co profesor (ademais do correo-e e o horario de *tutorías) e os seus compañeiros, ao mesmo tempo de ser a fonte de información de acceso inmediato para eles. Na plataforma de *teledocencia, poderán atopar a información básica e documentación sobre a materia que se imparte, a axenda de actividades, os exercicios propostos, a guía de prácticas, a planificación de talleres e as cualificacións.
Seminario	Tras as sesións maxistrais, dedicaranse os seminarios á resolución de supostos prácticos, asociados a problemas/exercicios, nos que se pretende afianzar o nivel de comprensión dos estudantes nos temas tratados. Estes problemas/exercicios, en principio, trabállanse en clase en grupos reducidos, logo expónse un debate xeral sobre os mesmos e, máis tarde, o estudante terá que resolvelos a nivel individual. Tamén se realizará a discusión de casos prácticos e traballos científicos relacionados cos contidos, cuxo obxectivo é reforzar os coñecementos adquiridos nas clases teóricas e facilitar a aprendizaxe cando teñan que abordar a parte experimental da materia. Os seminarios teñen carácter obrigatorio.
Prácticas de laboratorio	As clases prácticas de laboratorio teñen un papel fundamental na docencia da materia e, por tanto, son obrigatorias. Por unha banda, son imprescindibles para a comprensión das teorías e conceptos impartidos nas clases; e por outra, permiten formar ao estudante no manexo da metodoloxía analítica, así como as normas e regras do traballo científico, tanto a nivel de traballo en grupo como individual, incluíndo a redacción de informes. Trátase, en definitiva de obxectivos de carácter *procedimental. No desenvolvemento das prácticas, é obrigatorio o caderno de laboratorio: o alumno terao que elaborar de forma individual, aínda que se traballe en grupo ou equipo. O uso dos Tics (*MooVi e O meu *Moodle) será o recurso que permita ao alumno a comunicación co profesor e os seus compañeiros, ao mesmo tempo de ser a fonte de información de acceso inmediato para eles. Na plataforma de tele-docencia, poderán atopar a información básica e documentación sobre a materia que se imparte, a axenda de actividades, os exercicios propostos, a guía de prácticas, a planificación de talleres e as cualificacións.
Obradoiro	Formaría parte do nexo de unión entre os seminarios e as prácticas de laboratorio nos que os estudante deberán resolver por si mesmos, baixo a supervisión periódica do profesor, pero cunha maior autonomía, supostos prácticos reais de procesos *electroquímicos, detección e determinación de compostos de interese (contaminantes, fármacos, *biomoléculas, *etc) e deseñar estratexias de análises, incluíndo a metodoloxía máis apropiada para a preparación da mostra. Tanto nos seminarios como nos talleres farase un seguimento do traballo persoal que estea a realizar o estudante en cada momento. Realizaranse debates que servirán para a resolución de problemas reais, así como para expor conceptos complementarios, abordados ou non noutras materias, pero necesarios na formulación de devandito problema. Esta tarefa é obrigatoria e estará suxeita ao seguimento personalizado da evolución do estudante no proceso de aprendizaxe.

Atención personalizada

Metodoloxías	Descrición
Lección maxistral	O programa de *tutorías configúrase como elemento de apoio ao estudo, onde o/o alumno/a disporá dunha asistencia académica personalizada que redunde nun mellor aproveitamento da formación e coñecementos que lle brinda a materia. Ademais das *tutorías presenciais e/ou vía correo electrónico, o traballo dos alumnos, a nivel individual ou en grupo, tamén será *tutorizado a través da Plataforma *MooVi ou a través do campus remoto. As *tutorías son anuais e serán concertadas (por correo-e dirixido a todo o profesorado implicado na docencia da materia) e acordadas entre o alumno/a e o profesor, atendendo á dispoñibilidade de ambas as partes.

Seminario	O programa de *tutorías configúrase como elemento de apoio ao estudo, onde o/o alumno/a disporá dunha asistencia académica personalizada que redunde nun mellor aproveitamento da formación e coñecementos que lle brinda a materia. Ademais das *tutorías presenciais e/ou vía correo electrónico, o traballo dos alumnos, a nivel individual ou en grupo, tamén será *tutorizado a través da Plataforma *MooVi ou a través do campus remoto. As *tutorías son anuais e serán concertadas (por correo-e dirixido a todo o profesorado implicado na docencia da materia) e acordadas entre o alumno/a e o profesor, atendendo á dispoñibilidade de ambas as partes.
Prácticas de laboratorio	O programa de *tutorías configúrase como elemento de apoio ao estudo, onde o/o alumno/a disporá dunha asistencia académica personalizada que redunde nun mellor aproveitamento da formación e coñecementos que lle brinda a materia. Ademais das *tutorías presenciais e/ou vía correo electrónico, o traballo dos alumnos, a nivel individual ou en grupo, tamén será *tutorizado a través da Plataforma *MooVi ou a través do campus remoto. As *tutorías son anuais e serán concertadas (por correo-e dirixido a todo o profesorado implicado na docencia da materia) e acordadas entre o alumno/a e o profesor, atendendo á dispoñibilidade de ambas as partes.
Obradoiro	O programa de *tutorías configúrase como elemento de apoio ao estudo, onde o/o alumno/a disporá dunha asistencia académica personalizada que redunde nun mellor aproveitamento da formación e coñecementos que lle brinda a materia. Ademais das *tutorías presenciais e/ou vía correo electrónico, o traballo dos alumnos, a nivel individual ou en grupo, tamén será *tutorizado a través da Plataforma *MooVi ou a través do campus remoto. As *tutorías son anuais e serán concertadas (por correo-e dirixido a todo o profesorado implicado na docencia da materia) e acordadas entre o alumno/a e o profesor, atendendo á dispoñibilidade de ambas as partes.
Probas	Descrición
Informe de prácticas, prácticum e prácticas externas	O programa de *tutorías configúrase como elemento de apoio ao estudo, onde o/o alumno/a disporá dunha asistencia académica personalizada que redunde nun mellor aproveitamento da formación e coñecementos que lle brinda a materia. Ademais das *tutorías presenciais e/ou vía correo electrónico, o traballo dos alumnos, a nivel individual ou en grupo, tamén será *tutorizado a través da Plataforma *MooVi ou a través do campus remoto. As *tutorías son anuais e serán concertadas (por correo-e dirixido a todo o profesorado implicado na docencia da materia) e acordadas entre o alumno/a e o profesor, atendendo á dispoñibilidade de ambas as partes.

Avaliación				
	Descrición	Cualificación	Resultados de Formación e Aprendizaxe	
Seminario	CASOS PRÁCTICOS: aplicación das técnicas na RESOLUCIÓN DE PROBLEMAS ambientais, clínicos, industria alimentaria, etc. Farase un seguimento personalizado do estudante e avaliable por parte do profesor, considerando o grao de participación polos estudantes nos casos prácticos que se expoñan nas clases de seminarios para a resolución de problemas analíticos en diferentes campos de aplicación. Terase en conta a capacidade para resolver preguntas e cuestións que xurdan relacionadas co tema, tanto a forma de expolas (capacidade para sintetizar, explicar e transmitir a información) como de defendelas con vehemencia.	10	A1 B5 C6 D1 A3 C13 C26	
Prácticas de laboratorio	EXPERIMENTAL NO LABORATORIO O profesorado implicado realizará un seguimento personalizado do traballo experimental realizado polo estudante nas sesións de laboratorio, o seu progreso, autonomía, actitude, aptitude e destrezas desenvolvidas, así como a súa capacidade para traballar en grupo. É importante indicar que é OBRIGATORIO E IMPRESCINDIBLE a asistencia a TODAS as sesións de laboratorio e superar a actividade para optar ao aprobado na materia. Loxicamente, terán suspensa as prácticas de laboratorio os estudantes que non teñan completa ou suspendan esta actividade. Débese alcanzar unha cualificación mínima de 4/10 para optar ao aprobado da materia.	15	A1 B5 C6 D1 A3 C13 C26	
Obradoiro	Resolución de SUPOSTOS PRÁCTICOS (diseño de experimentos, preámbulo do laboratorio) Farase un seguimento personalizado do estudante e avaliarase a forma de defender/presentar a información, referendada pola procura bibliográfica fiable (capacidade para buscar, valorar, clasificar e seleccionar información), así como a capacidade para estruturar, sintetizar, criticar e interrelacionar os contidos para a resolución do suposto práctico ou caso exposto.	5	A1 B5 C6 D1 A3 C13 C26	

Exame de preguntas obxectivas	Realizarase unha proba curta de preguntas obxectivas dos temas tratados en seminarios/talleres que pode incluír preguntas teórico-prácticas/problemas ou tipo test. Dita proba serve, ao mesmo tempo, para que o estudante valore e avalíe a súa metodoloxía de estudo. Para poder compensar co resto da avaliación, deberase alcanzar unha cualificación final total de 4/10 (e nota mínima de 4/10 en cada unha das partes da proba).	10	A1 B5 C6 D1 A3 C13 C26
	O día e hora, así como a aula, será pública e a información estará recollida na programación académica do centro, previamente aprobada por Xunta de Facultade.		
Exame de preguntas de desenvolvemento	Corresponde á proba oficial (convocatorias ordinaria e/ou extraordinaria) e OBRIGATORIA para todos os estudantes matriculados. Está constituída por tres partes: teórico (5%), teórico-práctico (15%) e problemas (15%) que integra o desenvolvemento dun procedemento analítico e/ou resolución dun suposto práctico. Para poder compensar co resto da avaliación, deberase alcanzar unha cualificación final total de 4/10 (e nota mínima de 4/10 en cada unha das partes da proba).	40	A1 B5 C6 D1 A3 C13 C26
	O día e hora, así como a aula, será pública e a información estará recollida na programación académica do centro, previamente aprobada por Xunta de Facultade.		
	OBSERVACIÓN: En caso de estar varios docentes implicados na materia (en teoría/seminarios), a cualificación que debe obter o estudante na parte impartida e avaliable por cada profesor terá que ser maior ou igual a 3,5/10, sendo o requisito necesario para que leve a cabo a *ponderación global do exame. Non alcanzada esta cualificación, o resultado final é de suspenso.		
Informe de prácticas, prácticum e prácticas externas	Por indicación do profesor, o equipo de traballo elaborará os informes das prácticas (*nº de páxinas limitada), nos que se reflectirá o traballo realizado no laboratorio polo equipo. Seguiranse dous modelos: científico e técnico. Valorarase o feito de axustarse ás normas, a proposta de título, *maquetación, discusión de resultados, capacidade de síntese nas conclusións, etc.	10	A1 B5 C6 D1 A3 C13 C26
	Servirán como modelo os artigos científicos/informes técnicos manexados nas prácticas. Tomar como modelo non significa *PLAGIAR, o cal será penalizado cun CERO na cualificación dos informes. Devanditos informes, ben sexan científicos ou técnicos, deben entregarse no prazo establecido e serán corrixidos polo profesor. Débese alcanzar unha cualificación mínima de 4/10 para optar ao aprobado da materia.		
Práctica de laboratorio	Practicarase unha proba de laboratorio, a nivel individual, que permitirá avaliar as competencias e destrezas adquiridas polo alumno durante as sesións de laboratorio. Dita proba realizarase ao final das sesións de laboratorio e ten carácter obrigatorio, debendo alcanzar unha cualificación mínima de 4/10 para optar ao aprobado da materia.	10	A1 B5 C6 D1 A3 C13 C26

Outros comentarios sobre a Avaliación

1.-A ***EVALUACIÓN** continua se *hará tendo en conta a *calificación das distintas actividades/probas que se describen neste apartado (ver *ítems de *evaluación arriba). É **imprescindible alcanzar unha *calificación de 5/10 en cada unha de pártelas/actividades/probas que se *evalúan para SUPERAR a materia**. *Ademais, *será necesario alcanzar unha *calificación *mínima de 4/10 en cada unha desas actividades/probas propostas para **OPTAR Ao APROBADO da materia**. En caso de non conseguir a nota *mínima esixida nalguna das actividades/probas, supón a *calificación de **SUSPENSO** na materia; a *calificación que *figurarán na acta *será a nota ponderada *máis alta alcanzada, reflectindo *así a *calificación *máis fiel e real das actividades/probas realizadas polo estudante (Regulamento sobre *evaluación, a *calificación e a calidade da docencia e do proceso de aprendizaxe do estudante, aprobado no claustro do 18 de abril de 2023, *Título *V. Da *calificación do estudante, *Art. 31.2.).

A ASISTENCIA ÁS *PRÁCTICAS E Aos SEMINARIOS/TALLERES, *así como o desenvolvemento e a *realización das actividades/probas asociadas (ver *ítems de *evaluación), é **OBRIGATORIO para TODOS Os ESTUDANTES MATRICULADOS**, acóllanse á *evaluación continua ou global. **As *prácticas, os informes e os seminarios/talleres non son *recuperables** na segunda nin sucesivas convocatorias. A **AUSENCIA nas *prácticas e/ou seminarios/talleres, *así como a non entrega dos informes en grupo, non son *recuperables** na segunda nin sucesivas convocatorias, impedindo *tamén superar a *evaluación global (no caso do alumnado que optase por este modo de *evaluación).

A ENTREGA DOS INFORMES DE *PRÁCTICAS, dentro do prazo establecido polo profesorado, é **OBRIGATORIA**. Todos os informes se *pasarán por programas *anti-plaxio e só se *permitirá un *máximo do 10% de similitude. A *detección de plaxio cunha similitude superior ao 10% *tenderá como consecuencia o **SUSPENSO na actividade**, cunha *calificación de **CERO** e sen *opción a recuperar (Regulamento sobre *evaluación, a *calificación e a calidade da docencia e do proceso de aprendizaxe do estudante, aprobado no claustro do 18 de abril de 2023, *Título VII. Do uso de medios *ilícitos, *Art. 40.).

A *calificación obtida nas distintas actividades/probas de *evaluación obrigatorias, sempre que alcance o *máximo de 4/10, se *mantendrá para a convocatoria de xullo, polo que nesta convocatoria o estudante se *presentará só ás partes que non supere na primeira convocatoria.

2.- ***EVALUACIÓN GLOBAL:** á *calificación definitiva desta proba se *trasladarán as cualificacións obtidas nas actividades de *carácter obrigatorio e desenvolvidas nas *prácticas de laboratorio e nos seminarios/talleres. **O estudante que desexe acollerse á *evaluación global, *deberá entregar á coordinadora da materia, NO PRAZO DE DÚAS SEMANAS desde o inicio da docencia, un escrito asinado no que faga constar que opta por dita *evaluación global**, o que lle *impedirá volver á *evaluación continua.

3.- En canto á *realización das probas ou calquera exame oficial da materia, é **OBRIGATORIO levar consigo para poder acceder á aula: DNI/*NIF ou carné de conducir, CALCULADORA SIMPLE (non *programable ou *electrónica) e 2 *BOLÍGRAFOS AZUIS**. Non se *permitirá o uso dunha calculadora allea. Por tanto, non se *permitirá o acceso á aula co seguinte material NON AUTORIZADO: correctores (*tipex), *lapiceros, *TELÉFONO, *MÓVIL, RELOXO INTELIXENTE Ou CALQUERA OUTRO DISPOSITIVO *ELECTRÓNICO, abrigos, cazadoras, *parcas, *sudaderas *marsupiales, bufandas e similares, etc.

O material non permitido e detectado na interior da aula durante a *realización das probas *será confiscado polo profesorado e non se *tenderá dereito a *devolución. *Ademais, o incumprimento destas normas, establecidas polo profesorado e coñecidas polo alumnado con bastante *antelación ás probas e/ou *exámenes ao ser publicadas na *GUÍA DOCENTE DA MATERIA, se *considerará comportamento fraudulento e *tenderá consecuencias de *Ándole *disciplinar (Regulamento sobre *evaluación, a *calificación e a calidade da docencia e do proceso de aprendizaxe do estudante, aprobado no claustro do 18 de abril de 2023, *Título VII. Do uso de medios *ilícitos, *Art. 41.)

O uso de medios ou materiais *ilícitos *implicará a *finalización da proba e o abandono inmediato da aula, aparecendo un SUSPENSO en Actas (facendo constar a falta no expediente) e perdendo os dereitos a realizar CALQUERA ACTIVIDADE, PROBA ou EXAME DA MATERIA durante o resto do curso. *Também se *notificará a falta cometida aos responsables do Centro e do *Dpto. para que notifiquen, á súa vez, ás autoridades superiores para que tomen as medidas oportunas (Regulamento sobre *evaluación, a *calificación e a calidade da docencia e do proceso de aprendizaxe do estudante, aprobado no claustro do 18 de abril de 2023, *Título VII. Do uso de medios *ilícitos, *Art. 42.).

4.- Todas as actividades que se desenvolvan na aula ou nos laboratorios, o material de apoio (presentacións), etc. *están suxeitas aos dereitos da propiedade intelectual e de imaxe. Os docentes da materia non permiten ser gravados, nin por *vídeos nin por audios ou calquera outro formato como os *pantallazos, durante o desenvolvemento das clases presenciais ou nas *teleáticas. O que se comunica para os efectos oportunos polas posibles consecuencias de *Ándole disciplinarias que se poidan producir.

NOTA: Recoméndase a lectura do documento Regulamento sobre *evaluación, a *calificación e a calidade da docencia e do proceso de aprendizaxe do estudante, aprobado no claustro do 18 de abril de 2023, que *estarán dispoñible en *MooVi ao comezo do curso.

***EVALUACIÓN DO ALUMNADO DO PROGRAMA DE MAIORES**

- 1.- Asistencia ás actividades programadas 40%
- 2.- Seguimento das actividades realizadas 30%
- 3.- O *análisis en casa (sensores e dispositivos *portátiles) 30%

Bibliografía. Fontes de información

Bibliografía Básica

Hernández, L y González, C, **Introducción al análisis instrumental**, Ariel, 2002

Skoog, DA; Holler, FJ y Crouch, SR, **Principios de análisis instrumental**, 7, Cengage Learning Editores, 2018

Wang, J, **Analytical Electrochemistry**, 3, Wiley, 2006

Cela, R; Lorenzo, RA y Casais, MC, **Técnicas de separación en química analítica**, Síntesis, 2002

Bibliografía Complementaria

Monk, PMS, **Fundamentals of Electroanalytical Chemistry**, Wiley, 2001

Riley, T y Watson, A, **Polarography and other Voltammetric Methods**, Wiley, 1987

Kissinger, PT y Heineman, WR, **Laboratory Techniques in Electroanalytical Chemistry**, Marcel Dekker, INC, 1984

Valcárcel, M y Silva, M, **Teoría y práctica de la extracción líquido-líquido**, Alhambra, 1984

Miller, JM, **Separation Methods in Chemical Analysis**, Wiley, 1974

Recomendacións

Materias que continúan o temario

Química analítica IV: Métodos cromatográficos e afíns/V11G201V01306

Materias que se recomenda cursar simultaneamente

Enxeñaría química/V11G201V01301

Química inorgánica III: Química de coordinación/V11G201V01304

Química orgánica III: Reaccións concertadas, radicalarias e fotoquímicas/V11G201V01305

Materias que se recomenda ter cursado previamente

Física: Física II/V11G201V01107

Química: Laboratorio de química I/V11G201V01105

Química: Laboratorio de química II/V11G201V01110

Química: Química I/V11G201V01104

Química: Química II/V11G201V01109

Bioquímica/V11G201V01201

Química analítica I: Principios de química analítica/V11G201V01202

Química analítica II: Métodos ópticos de análise/V11G201V01207

Química física I: Termodinámica química/V11G201V01203

Química física II: Superficies e coloides/V11G201V01208

Química inorgánica II/V11G201V01209

Química orgánica I/V11G201V01205

DATOS IDENTIFICATIVOS				
Química física III: Química cuántica				
Materia	Química física III: Química cuántica			
Código	V11G201V01303			
Titulación	Grao en Química			
Descritores	Creditos ECTS	Sinale	Curso	Cuadrimestre
	6	OB	3	1c
Lingua de impartición	#EnglishFriendly Galego			
Departamento	Química Física			
Coordinador/a	Mosquera Castro, Ricardo Antonio			
Profesorado	Hermida Ramón, José Manuel Mosquera Castro, Ricardo Antonio Peña Gallego, María de los Ángeles Pérez Barcia, Álvaro			
Correo-e	mosquera@uvigo.es			
Web				
Descrición xeral	Preséntanse os fundamentos da química cuántica que se aplican en modelos simples para describir: a) movementos nucleares en moléculas; e b) a estrutura electrónica dos átomos. Materia do programa English Friendly. Os/ as estudantes internacionais poderán solicitar ao profesorado: a) materiais e referencias bibliográficas para o seguimento da materia en inglés, b) atender as titorías en inglés, c) probas e avaliacións en inglés.			

Resultados de Formación e Aprendizaxe

Código	
A1	Que os estudantes saiban aplicar os seus coñecementos ó seu traballo ou vocación dunha forma profesional e posúan as competencias que adoitan demostrarse por medio da elaboración e defensa de argumentos e a resolución de problemas dentro da súa área de estudo
A5	Que os estudantes desenvolvan aquelas habilidades de aprendizaxe necesarias para emprender estudos posteriores cun alto grao de autonomía
B1	Capacidade de aprendizaxe autónomo
B2	Capacidade de organización y planificación
B4	Capacidade de análise e síntese
C1	Capacidade para coñecer e comprender os feitos esenciais, conceptos, principios e teorías relacionadas coa Química
C4	Utilizar adecuadamente ferramentas informáticas para obter información, procesar datos, realizar cálculos computacionais e calcular propiedades da materia
C14	Coñecer os principios da mecánica cuántica e a súa aplicación na descrición da estrutura e as súas propiedades de átomos e moléculas
D1	Capacidade para resolver problemas

Resultados previstos na materia

Resultados previstos na materia	Resultados de Formación e Aprendizaxe			
Escribir e aplicar os operadores fundamentais da mecánica *cuántica utilizando os conceptos básicos da teoría de operadores para calcular funcións e valores propios, valores medios e máis probables nos sistemas modelo (partícula na caixa, *oscilador *armónico, *rotor ríxido, modelo *electrostático do átomo *monoelectrónico).		B2 B4	C1 C14	D1
Describir as funcións e valores propios dos sistemas modelo.		B1 B2 B4	C1 C14	
Utilizar os métodos de variacións e perturbacións para tratar sistemas máis complexos (átomos *polielectrónicos, *oscilador *anarmónico, etc.)	A1 A5	B1 B2 B4	C1 C4 C14	D1
Expor solucións aproximadas para a ecuación de *Schrödinger de átomos *polielectrónicos e describir a súa estrutura electrónica utilizando modelos de axuste de momentos angulares.		B1 B2 B4	C1 C14	D1
Describir os espectros de átomos *monoelectrónicos e *polielectrónicos.	A1 A5	B1 B2 B4	C1 C4 C14	D1
Aplicar a teoría de grupos de *simetría no contexto da química	A1 A5	B2	C1	D1

Contidos

Tema

1. Fundamentos da mecánica *cuántica.	1.1. Orixe da mecánica cuántica (feitos experimentais). Formalismos da mecánica cuántica. Mecánica cuántica non relativista. Unidades atómicas. 1.2. Existencia da función de onda. Condicións de bo comportamento. Funcións de onda dunha e varias partículas. Determinantes de Slater e as súas propiedades. Interpretación da función de onda. Normalización. Funcións de onda moleculares e atómicas. Separación de movementos. 1.3. Operadores. Hermiticidade. Espectros de valores para unha magnitude. Ecuación de valores propios. Ortogonalidade. Conmutación. Operadores de momento angular. Operadores escaleira. Operadores de simetría. Grupos puntuais de simetría. Clasificación das funcións de onda pola súa simetría (especies de simetría). Táboas de caracteres. 1.4. Valor medio. Valor máis probable. Relacións de indeterminación. Teoremas do hipervirial e do virial. 1.5. Evolución da función de onda co tempo (Ecuación de Schrödinger dependente do tempo). Estados estacionarios (Ecuación de Schrödinger independente do tempo).
2. Translación molecular	2.1. Partícula libre en espazos monodimensionais e tridimensionais. 2.2. Partícula nunha caixa monodimensional de paredes infinitas de potencial. 2.3. Partícula nunha caixa tridimensional. Dexeneración dos niveis. 2.4. Partícula sometida a saltos de potencial. Coeficientes de reflexión e transmisión. 2.5. Barreiras de potencial non infinito. Efecto túnel.
3. Tratamentos aproximados para resolver a ecuación de *Schrödinger.	3.1. Método de variacións. *Teorema de *Eckart. 3.2. Funcións *variacionais tipo combinación lineal. Determinante secular. 3.3. Teoría de perturbacións independente do tempo en niveis non *degenerados. 3.4. Teoría de perturbacións independente do tempo en niveis *degenerados. 3.5. Tratamento *semiclásico da interacción radiación-materia: teoría de perturbacións dependente do tempo. Consecuencias na interacción *inelástica radiación-materia. Integral momento *dipolar de transición. Coeficientes de absorción e emisión estimulada. Coeficiente de emisión espontánea. Vida media dos estados excitados. 3.6. Distribución dunha mostra de partículas entre os seus niveis de enerxía (estatística de *Maxwell-*Boltzmann). Intensidade de absorción e emisión de radiación.
4. Rotación molecular.	4.1. Moléculas *diatómicas: *Rotor ríxido. 4.2. Moléculas *poliatómicas: *trompos esféricos, simétricos e *asimétricos. Tratamento ríxido 4.3. *Distorsión *centrífuga en moléculas *diatómicas.
5. Vibración molecular.	5.1. *Oscilador *armónico (moléculas *diatómicas). 5.2. Sistemas con *osciladores *armónicos axustados (moléculas *poliatómicas). 5.3. Efecto da *simetría molecular. 5.4. Limitacións do modelo *armónico. *Oscilador *anarmónico (moléculas *diatómicas).
6. Estrutura electrónica: átomos *monoelectrónicos.	6.1. Modelo *electrostático. Formulación da ecuación de *Schrödinger independente do tempo. 6.2. Resultados do modelo *electrostático. Orbitais *hidrogénicos. 6.3. *Espín electrónico. Axuste *espín-*órbita. Estrutura fina. 6.4. Estrutura *hiperfina. 6.5. Interpretación de espectros de átomos *monoelectrónicos. Efecto *Zeeman.
7. Estrutura electrónica: átomos *polielectrónicos.	7.1. Modelo *electrostático. Imposibilidade de resolver a ecuación de *Schrödinger por vía exacta. 7.2. Descrición do método *Hartree-*Fock. Limitacións. 7.3. Axuste de momentos angulares. 7.4. Interpretación de espectros de átomos *polielectrónicos.

Planificación

	Horas na aula	Horas fóra da aula	Horas totais
Lección maxistral	24	48	72
Resolución de problemas	12	30	42
Prácticas de laboratorio	14	14	28
Exame de preguntas de desenvolvemento	2	3	5

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

Metodoloxía docente

	Descrición
Lección maxistral	O profesor exporá os conceptos, métodos e coñecementos principais de cada tema. Orientará o traballo autónomo do alumno sinalando obxectivos e expondo cuestións e/ou exercicios. Na aula o alumno debe prestar atención á exposición, tomar as súas anotacións e formular as preguntas que considere necesarias. No traballo autónomo o alumno debe completar os elementos do tema que quedasen como traballo autónomo, resolver as cuestións que se lle expuxeron, assimilar esta información e, en caso necesario, elaborar novas preguntas que formular ao profesor en próximas sesións ou en tutorías.
Resolución de problemas	O profesor resolverá os exercicios que considere fundamentais en cada tema. Exporá problemas para resolución autónoma do alumno e motivará a participación do alumnado, animando a que en parte das sesións os alumnos sexan quen resolvan os problemas. O alumno debe asistir a estas clases con ánimo participativo, procurando entender a resolución dos exercicios e conectala cos coñecementos adquiridos en teoría. Debe desterrarse modelizar problemas e a súa resolución mecánica. No traballo autónomo debe resolver os problemas propostos e mesmo buscar por si mesmo outros relacionados.
Prácticas de laboratorio	Os profesores proporán exercicios máis longos que os habituais de clases de problemas. Na súa gran maioría resolveranse con computadores. Os alumnos deben actuar participativamente, pois eles serán os encargados de obter resultados aos exercicios propostos. No traballo autónomo deberán analizar os resultados obtidos. En todo momento é importante que relacionen o traballo realizado co estudado nas leccións maxistrais.

Atención personalizada

Metodoloxías	Descrición
Lección maxistral	O alumno poderá solicitar tutorías individualizadas para consultar as dúbidas que se vaian xerando no seu traballo autónomo.
Resolución de problemas	O alumno poderá solicitar tutorías individualizadas para consultar as dúbidas que se vaian xerando no seu traballo autónomo.
Prácticas de laboratorio	O alumno poderá solicitar tutorías individualizadas para consultar as dúbidas que se vaian xerando no seu traballo autónomo.
Probas	Descrición
Exame de preguntas de desenvolvemento	O alumno poderá solicitar tutorías individualizadas para consultar as dúbidas que se vaian xerando no seu traballo autónomo e para revisar os resultados dos seus exames.
Exame de preguntas de desenvolvemento	

Avaliación

	Descrición	Cualificación	Resultados de Formación e Aprendizaxe			
Resolución de problemas	Durante as clases de problemas poderá exporse, avisando con polo menos un día de antelación, a resolución independente e por escrito dun dos problemas que se propuxeron nese tema. Así mesmo valorarase (só de maneira positiva) a resolución voluntaria dun problema polo alumno ante os seus compañeiros (no *encerado).	10	A1 A5	B2 C1 C4 C14	D1	
Prácticas de laboratorio	A observación sistemática do traballo realizado, a resposta ás preguntas dos profesores, así como, no seu caso, a elaboración da memoria dunhas prácticas, serán valoradas. A realización satisfactoria das prácticas é requisito imprescindible para aprobar a materia. En caso de non superar esta parte da materia a cualificación global non poderá exceder 4,0 sobre 10 puntos.	10	A1 A5	B1 B2 C1 C4 B4 C14	D1	
Exame de preguntas de desenvolvemento	Durante o curso realizaranse os seguintes exames: a) Unha proba parcial que incluírá, probablemente, os temas 1, 2 e 3.	40	A1 A5	B1 B2 C1 C14 B4	D1	

Exame de preguntas de desenvolvemento	b) Un examen final, con dúas oportunidades, nas datas que fixe a Facultade: decembro/xaneiro na primeira e xuño/xullo na segunda. Este exame incluírá na primeira oportunidade os temas 4, 5, 6 e 7, agás para os alumnos que optasen pola avaliación global. Na segunda oportunidade este examen comprenderá toda a materia do curso.	40	A1 A5	B1 B2	C1 C4	D1 D4
---------------------------------------	--	----	----------	----------	----------	----------

Outros comentarios sobre a Avaliación

Norma 1: Para supera-la materia é indispensable ter realizado satisfactoriamente as prácticas. Iso require: a) ter asistido a todas as sesións de prácticas ou presentar un certificado que a xuízo dos profesores acredite causa xustificada para faltar a un máximo de 2 sesións; e b) acadar unha puntuación de 4,0 a xuízo do profesor encargado. Se non se cumpren ambos requisitos a calificación global non poderá exceder 4,0 puntos.

Norma 2: Cada examen (sexa parcial ou final) incluírá cuestións teóricas e problemas numéricos. Para supera-lo exame, ademais dunha calificación global de 5,0 puntos, será necesario obter unha puntuación mínima de 4,0 puntos sobre 10 nas cuestións teóricas e de 3,0 puntos sobre 10 nos problemas numéricos. En caso contrario a calificación global do examen nunca poderá ser superior a 4,0 puntos.

Norma 3. Os estudantes que, cumprindo a "norma 2", acaden unha puntuación igual ou superior a 4,2 sobre 10 puntos na proba parcial poderán presentarse ó exame final (en calquera das súas oportunidades) contendo unicamente os exercicios e cuestións relacionadas cos temas non incluídos no examen parcial. Esta opción deberá ser indicada ó profesor ó comenza-lo exame final. Ó aplicar esta opción a calificación global dos exames obterase promediando ambos exames con igual peso.

Norma 4. En caso de verificarse as normas anteriores, a calificación global da materia será a máis alta de: a) a obtida no exame (ou conxunto de exames utilizando as norma 3); e b) a resultante de aplicar la siguiente ponderación: resolución de exercicios 10%, prácticas de laboratorio 10%, conxunto de exames 80%.

Norma 5. En futuras convocatorias os estudantes que superaran as prácticas poderán solicitar un certificado coa calificación obtida nese curso. Este poderá servirles para solicitar a futuros profesores responsables a convalidación das prácticas. Acceder a esa convalidación dependerá, obviamente, da norma que sigan futuros profesores e non queda garantida.

Norma 6. Non se certificará a aprobación dun parcial coa materia suspensa. Non se contempla manter aprobadas partes da asignatura entre cursos académicos diferentes.

Norma 7. Durante o proceso de calificación, o profesorado da asignatura poderá requirir que, en entrevista persoal, o estudante despexe calquera dúbida que afecte a correcta calificación de calquera dos seus exames. Este procedemento aplicarase para casos de ilexibilidade, presunción de copia, e outros problemas nos que o profesorado considere que poden solventarse deste xeito.

Norma 8. A detección polo profesorado da asignatura, o por un vixilante do exame, de calquera tipo de copia supondrá a expulsión do exame e a calificación de cero, que será aplicada nesa oportunidade e nas seguintes dese curso.

Bibliografía. Fontes de información

Bibliografía Básica

Bertrán, J.; Branchadell, V.; Moreno, M; Sodupe, M., **Química cuántica**, 1, Síntesis, 2000

Bibliografía Complementaria

Levine, I. N., **Química cuántica**, 5, Prentice-Hall, 2001

Atkins, P.; Friedman, R., **Molecular quantum mechanics**, 5, Oxford University Press, 2011

Pilar, F. L., **Elementary quantum chemistry**, 2, McGraw-Hill, 1990

McQuarrie, D. A., **Quantum chemistry**, 1, Viva Books, 2003

Recomendacións

Materias que continúan o temario

Química física IV: Estrutura molecular y espectroscopia/V11G201V01307

Materias que se recomenda ter cursado previamente

Física: Física I/V11G201V01102

Física: Física II/V11G201V01107

Matemáticas: Matemáticas I/V11G201V01103

Matemáticas: Matemáticas II/V11G201V01108

DATOS IDENTIFICATIVOS				
Química inorgánica III: Química de coordinación				
Materia	Química inorgánica III: Química de coordinación			
Código	V11G201V01304			
Titulación	Grao en Química			
Descritores	Creditos ECTS	Sinale	Curso	Cuadrimestre
	6	OB	3	1c
Lingua de impartición	#EnglishFriendly Galego			
Departamento	Química inorgánica			
Coordinador/a	Vázquez López, Ezequiel Manuel			
Profesorado	Couce Fortúnez, María Delfina García Fontán, María Soledad Vázquez López, Ezequiel Manuel			
Correo-e	ezequiel@uvigo.es			
Web				
Descrición xeral	Nesta materia abórdase os aspectos máis relevantes da Química de Coordinación: Estudarase este tipo de compostos desde o punto de vista estrutural, sintético e así como as súas propiedades máis salientables. Materia do programa English Friendly. Os/ as estudantes internacionais poderán solicitar ao profesorado: a) materiais e referencias bibliográficas para o seguimento da materia en inglés, b) atender as titorías en inglés, c) probas e avaliacións en inglés.			

Resultados de Formación e Aprendizaxe

Código	
A2	Que os estudantes demostren posuír e comprender coñecementos nunha área de estudo que parte da base da educación secundaria xeral e adoita atoparse a un nivel que, malia se apoiar en libros de texto avanzados, inclúe tamén algúns aspectos que implican coñecementos procedentes da vangarda do seu campo de estudo
A3	Que os estudantes teñan a capacidade de reunir e interpretar datos relevantes (normalmente dentro da súa área de estudo) para emitir xuízos que inclúan unha reflexión sobre temas relevantes de índole social, científica ou ética
A5	Que os estudantes desenvolvan aquelas habilidades de aprendizaxe necesarias para emprender estudos posteriores cun alto grao de autonomía
B1	Capacidade de aprendizaxe autónomo
B3	Capacidade de xestión da información
B4	Capacidade de análise e síntese
C7	Distinguir os principais tipos de reaccións químicas e as características asociadas a eles
C15	Coñecer as principais técnicas de investigación estrutural, incluíndo a espectroscopia
C26	Levar a cabo correctamente procedementos habituais no laboratorio, incluíndo o uso de instrumentación química estándar para o traballo sintético e analítico
D2	Capacidade para traballar en equipo

Resultados previstos na materia

Resultados previstos na materia	Resultados de Formación e Aprendizaxe			
Definir as constantes de estabilidade termodinámica e formación por etapas dun complexo e describir os efectos quelato, macrociclo e criptato.				C7
Clasificar os ligandos e os compostos de coordinación, así como recoñecer a presenza de isomería.	A2	B3		C15
Deducir o término espectroscópico máis estable para a configuración electrónica do metal nun composto de coordinación.	A5			C15
Construír e interpretar un diagrama cualitativo de enerxías de orbitais moleculares para complexos octaédricos.	A5	B1		
Interpretar os espectros electrónicos dos complexos octaédricos e planocuadrados dos metais de transición e racionalizar o seu comportamento magnético.		B3 B4		C15
Describir os distintos tipos de mecanismos de substitución e racionalizar os distintos produtos obtidos en reaccións de substitución de complexos octaédricos e planocuadrados.		B3		C7
Racionalizar a estabilidade termodinámica dos compostos de coordinación en función do estado de oxidación do metal e do tipo de ligando.	A3	B3		C7
Ser que de levar a cabo no laboratorio a preparación dalgúns compostos de coordinación así como de realizar a súa determinación estrutural				C26 D2
Describir os mecanismos de esfera interna e esfera externa nos procesos de transferencia electrónica en complexos.				C7

Contidos	
Tema	
Tipos de ligandos.	Denticidade do ligando Funcionalidade de ligando
O poliedro de coordinación	Número de coordinación Xeometría de coordinación Isomería. Nomenclatura e índices de coordinación
O enlace en compostos de coordinación(I)	Introdución a teoría do campo cristalino Complexos octaédricos de campo débil e campo forte. Complexos tetraédricos e plano-cuadrados
Propiedades termodinámicas dos compostos de coordinación	Constantes de estabilidade e factores que as afectan Efecto quelato, macrociclo e criptato Series de Irvin-Williams Aproximación de Pearson
O enlace en compostos de coordinación(II)	Teoría de orbital molecular en complexos octaédricos Interacción metal-ligando
Propiedades espectroscópicas e magnéticas nos complexos.	Estados enerxéticos. Reglas de selección. Características xerais dos espectros electrónicos. Comportamento magnético
Mecanismos de reacción en compostos de coordinación.	Reaccións de substitución en complexos plano-cuadrados e octaédricos. Procesos de transferencia electrónica
Prácticas de laboratorio	Síntese compostos de coordinación de metais de transición Caracterización estrutural mediante diferentes técnicas espectroscópicas Estudo de propiedades e aplicacións en catálise

Planificación

	Horas na aula	Horas fóra da aula	Horas totais
Seminario	24	36	60
Prácticas de laboratorio	14	14	28
Lección maxistral	24	24	48
Exame de preguntas obxectivas	2	0	2
Informe de prácticas, prácticum e prácticas externas	0	12	12
Exame de preguntas obxectivas	0	0	0

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

Metodoloxía docente

	Descrición
Seminario	As clases de seminario adicaranse á resolución de casos prácticos relacionados coa materia así como á resolución de dúbidas ou cuestións que xurdisen no desenvolto de cada tema. Contemplase tamén realizar seminarios nos que se abordarán aspectos non impartidos en materias anteriores pero necesarios para a marcha do curso.
Prácticas de laboratorio	As prácticas de laboratorio constarán de 4 sesións de 3,5 horas presencias. Os/as estudantes realizarán diferentes experiencias no laboratorio e deberán confeccionar o correspondente libro de laboratorio Algunha das experiencias poderán precisar o estudo previo de xeito individual ou por grupo.
Lección maxistral	Nas clases teóricas se presentarán os aspectos fundamentais dos temas

Atención personalizada

Metodoloxías	Descrición
Seminario	Durante todo o período docente os/as estudantes poderán consultar todo tipo de dúbidas da materia en horario de tutorías ou previa cita.
Prácticas de laboratorio	Os alumnos poderan consultar a/os profesoras/es encargados en horario de tutorías ou previa cita as dúbidas do traballo nas prácticas de laboratorio
Lección maxistral	Durante todo o período docente os/as estudantes poderán consultar todo tipo de dúbidas da materia en horario de tutorías ou previa cita.

Avaliación

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

Seminario	Nas sesións de seminario se lles poderá pedir ás/os estudantes a resolución de cuestións sinxelas que deberán entregar nese momento e que servirán para a súa avaliación. A puntuación soamente será considerada se na proba longa se acadou unha calificación igual ou superior a 3 puntos sobre 10.	15		C7 C15
Prácticas de laboratorio	The evaluation in the laboratory practices will have 10% regarding the laboratory notebook (it can be through a written test) and 5% to the behavior and skills by direct observation of the teacher. Students may also be asked to solve simple questions that they must deliver at that time and that will serve for their evaluation.	15	A2 A3	C26 D2
Lección maxistral	Nas sesións maxistrais se lles poderá pedir ás/ os estudantes a resolución de cuestións sinxelas que deberán entregar nese momento e que servirán para a súa avaliación. A puntuación soamente será considerada se na proba longa se acadou unha calificación igual ou superior a 3 puntos sobre 10.	5	A3	B3 C7 B4 C15
Exame de preguntas obxectivas	Haberá dúas probas curtas (1 hora cada unha) onde se avaliarán as competencias adquiridas ata o momento. A data e hora de realización constará na programación académica aprobada na Xunta de Facultade correspondente.	30		C7 C15
Exame de preguntas obxectivas	Haberá unha proba final no que se fará unha avaliación de todas as competencias da materia. A data e hora de realización constará na programación académica aprobada na Xunta de Facultade correspondente.	35		C7 C15 C26

Outros comentarios sobre a Avaliación

Condições que afectan a **calquera tipo de avaliación**:

- Todas as probas escritas incluírán un conxunto de cuestións de nomenclatura e formulación de compostos inorgánicos simples. De non acadar o 90% de respostas correctas, a cualificación da correspondente proba non será considerada na correspondente avaliación.
- O profesor pode solicitar, de forma presencial a/o estudante, as aclaracións que estime oportunas ao respecto das súas respostas en calquera das probas escritas. A súas contestacións poderán ser consideradas na avaliación da proba e modificar a súa calificación.
- As prácticas de laboratorio son de carácter experimental e de **asistencia obrigatoria a todas** as sesións (artigo 14 do Regulamento Sobre Avaliación, A Cualificación e a Calidade da Docencia e do Proceso de Aprendizaxe do Estudantado da Universidade de Vigo). A avaliación de competencias de carácter experimental realizaránse nas sesións de asistencia obrigatoria.
- A cualificación final das/dos estudantes, de ser superior a 7 puntos sobre 10, poderá ser normalizada de forma que a cualificación máis alta poda ser ata 10 puntos.

Avaliación continua

Condições para optar a **avaliación continua**:

- **É obrigatoria a asistencia as clases** teóricas e seminarios (artigo 13 regulamento de Avaliación) e prácticas de laboratorio
- O profesor/a debe dispor en tempo e forma dun mínimo do 80% dos entregables propostos nas distintas actividades presencias (exercicios en clases teóricas e seminarios ou exercicios de traballo autónomo) ao final do curso.
- É tamén obrigatorio que o/a estudante se presente a todas as probas escritas planificadas para superar a materia.
- O incumprimento de calquera destas condicións implica a perda de dereito a avaliación continua.

Desenrolo da avaliación continua:

- As competencias específicas da materia relacionadas coas competencias da titulación (CE7, CE15 e CE26) se avaliarán de forma explícita en exercicios na aula e probas escritas. As competencias básicas, xerais e transversais serán avaliadas de forma implícita na cualificación dos exercicios.
- Será necesario unha puntuación superior ou igual ó 30% do valor total en cada unha das probas escritas (curtas e final) e na suma total das cualificacións dos entregables, así como dun 50% das prácticas de laboratorio, para que na cualificación final se teña en conta o resto dos elementos de avaliación (entregables e probas curtas).
- No caso de non acadar algún dos mínimos, na acta figurará o resultado ponderado das probas e exercicios cualificados nos que se acadou o criterio.
- Os alumnos que non superen a materia ó final do cuadrimestre deberán facer unha proba escrita no período de peche de avaliación definitivo no mes de xullo. Dita proba terá un valor do 35% da nota e substituirá os resultados da proba do final de cuadrimestre.

- A cualificación dos entregables (das actividades presenciais) e probas curtas non son recuperables.

Avaliación global

1) Por incumprimento das condicións para avaliación continua

No caso de non acadar as condicións para avaliación continua, o/a estudante poderá presentarse a unha proba ó final do cuatrimestre onde deberá resolver cuestións relacionadas con **tódalas competencias específicas** da materia. De ter superado a competencia CE26 (relativa a prácticas de laboratorio) no mesmo curso, esta será considerada como superada.

2) No prazo determinado pola Facultade de Química, o/a estudante pode solicitar a avaliación global.

- Respecto a proba de avaliación global, esta será escrita e nn cada pregunta ou cuestión, se identificará a competencia resultado de aprendizaxe que se está a avaliar. Nese caso:
 1. Será necesario obter un mínimo de 3 ptos sobre 10 de media na avaliación naquelas relacionadas coas competencias CE7 e CE15 e de 5 nas relacionadas coa competencia CE26 (competencias de traballo de laboratorio) para superar a materia
 2. Será necesario obter unha cualificación global igual ou superior a 5 sobre 10 nesa proba para superar a materia e, en ningún caso terase en conta as cualificacións anteriores obtida durante o cuatrimestre
- Esta proba será diferente en extensión á realizada por aqueles que opten por avaliación continua aínda que realizárase na mesma data.

Bibliografía. Fontes de información

Bibliografía Básica

Bhatt, Vasishta, **Essentials of coordination chemistry [Recurso de Internet] : a simplified approach with 3D visuals**, Elsevier : Academic Press, 2016

Catherine E. Housecroft, Alan G. Sharpe ; traducción Pilar Gil Ruiz,, **Química inorgánica**, 2ª, Pearson Prentice Hall, 2006

Catherine E. Housecroft, Alan G. Sharpe, **Inorganic Chemistry**, 5ª, Harlow: Pearson Education, 2018

Bibliografía Complementaria

Ribas Gispert, Joan, **Coordination chemistry**, Wiley-VCH, 2008

Winter, Mark J., **D-block chemistry**, 2ª, Oxford University Press, 2015

Huheey, James E., **Inorganic chemistry : principles of structure and reactivity**, 4ª, New York : Harper Collins, 1993

Recomendacións

Materias que continúan o temario

Química inorgánica IV: Metais de transición e estado sólido/V11G201V01309

Materias que se recomenda cursar simultaneamente

Química física III: Química cuántica/V11G201V01303

Materias que se recomenda ter cursado previamente

Química inorgánica I/V11G201V01204

Química inorgánica II/V11G201V01209

DATOS IDENTIFICATIVOS				
Química orgánica III: Reaccións concertadas, radicalarias e fotoquímicas				
Materia	Química orgánica III: Reaccións concertadas, radicalarias e fotoquímicas			
Código	V11G201V01305			
Titulación	Grao en Química			
Descritores	Creditos ECTS	Sinale	Curso	Cuadrimestre
	6	OB	3	1c
Lingua de impartición	#EnglishFriendly Castelán Galego			
Departamento	Química orgánica			
Coordinador/a	Nieto Faza, Olalla			
Profesorado	Gómez Bouzó, Uxía Gómez Pacios, María Generosa Nieto Faza, Olalla Silva López, Carlos			
Correo-e	faza@uvigo.es			
Web				
Descrición xeral	Nesta materia estudaranse procesos radicalarios, pericíclicos e fotoquímicos mediante unha aproximación organizada arredor dos seus mecanismos e selectividade. A metodoloxía, centrada na resolución de problemas, inclúe prácticas de laboratorio e modelización molecular.			
	Materia do programa English Friendly: O alumnado internacional poderá solicitar ó profesorado a) materiais e referencias bibliográficas para seguir a materia en inglés, b) atención en inglés nas titorías e c) probas e avaliacións en inglés.			

Resultados de Formación e Aprendizaxe	
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
A4	Que os estudantes poidan transmitir información, ideas, problemas e solución a un público tanto especializado coma non especializado
B3	Capacidade de xestión da información
B4	Capacidade de análise e síntese
C18	Coñecer as propiedades dos compostos alifáticos, aromáticos, heterocíclicos e organometálicos
C19	Coñecer as principais rutas de síntese na química orgánica, incluíndo as interconversións de grupos funcionais e a formación dos enlaces carbono-carbono e carbono-heteroátomo
C27	Demostrar capacidade para a observación, o seguimento e a medida dos procesos químicos, mediante o seu rexistro sistemático e fiable e a presentación de informes do traballo realizado
C28	Interpretar os datos derivados das observacións e medidas do laboratorio en termos do seu significado e relacionalos coa teoría adecuada
D3	Capacidade para comunicarse de forma oral e escrita en castelán e/ou galego e/ou inglés

Resultados previstos na materia	
Resultados previstos na materia	Resultados de Formación e Aprendizaxe
Coñecer e aplicar os factores que afectan á estabilidade de radicaís orgánicos.	A3 B3 C18 D3 A4 B4 C19
Recoñecer e comprender mecanismos de reacción radicalarios e utilizar ese coñecemento para propoñer estratexias para evitalos ou explotalos.	A3 B3 C18 D3 A4 B4 C19
Utilizar as regras de Woodward-Hoffmann para diferenciar entre camiños de reacción permitidos e prohibidos en reaccións pericíclicas.	A3 B3 C18 D3 A4 B4 C19
Recoñecer os mecanismos pericíclicos máis comúns (electrociclacións, cicloadicións, reaccións sigmatrópicas e énicas) e utilízalos en secuencias sintéticas.	A3 B3 C18 D3 A4 B4 C19
Predicir a rexio e estereoselectividade de reaccións pericíclicas.	A3 B3 C18 D3 A4 B4 C19
Comprender os mecanismos de activación fotoquímica de moléculas orgánicas.	A3 B3 C18 D3 A4 B4 C19
Comprender e aplicar os mecanismos de reaccións fotoquímicas: isomerizacións de dobre enlace, fotodisociacións, fotorreducións e reaccións pericíclicas.	A3 B3 C18 D3 A4 B4 C19

Levar a cabo reaccións pericíclicas, radicalarias e fotoquímicas e elaborar, separar e purificar os seus produtos mediante técnicas habituais.	A3 A4	B3 B4	C18 C19 C27 C28	D3
Utilizar técnicas espectroscópicas para determinar a estrutura de compostos orgánicos.	A3 A4	B3 B4	C18 C27 C28	D3
Utilizar ferramentas de modelización molecular para estudar as propiedades de compostos orgánicos e mecanismos de reacción.	A3 A4	B3 B4	C18 C19 C27 C28	D3

Contidos

Tema

Tema 1. Mecanismos de reacción	1.1. Mecanismo de reacción. Perfís de reacción e teoría do estado de transición. 1.2. Forza condutora da reacción. Teoría dos orbitais fronteira. 1.3. Tipos de selectividade en transformacións orgánicas. 1.4. Clasificacións de mecanismos.
Tema 2. Reaccións radicalarias	2.1. Rotura homolítica vs. rotura heterolítica de enlaces. 2.2. Estabilidade de radicais. 2.3. Reaccións en cadea, haloxenación de alcanos. 2.4. Polimerizacións radicalarias. 2.5. Reducións e acoplamentos redutivos radicalarios 2.6. Reaccións radicalarias na natureza
Tema 3. Reaccións pericíclicas	3.1. Reglas de Woodward-Hoffmann. Conservación da simetría orbital e aromaticidade do estado de transición. Reaccións permitidas e prohibidas térmicas e fotoquímicas. 3.2. Electrociclacións. 3.3. Cicloadicións. Teoría dos orbitais fronteira. 3.4. Reaccións sigmatrópicas e énicas.
Tema 4. Reaccións fotoquímicas	4.1. Espectros UV/vis de moléculas orgánicas. Propiedades dos estados excitados. 4.2. Procesos fotofísicos: desactivación unimolecular, conversión interna, cruces entre sistemas, emisión (fluorescencia, fosforescencia) 4.3. Isomerización de dobre enlace. 4.4. Fotodisociacións. 4.5. Fotorreducións. 4.6. Reaccións pericíclicas. 4.7. Reaccións fotoquímicas na natureza.
Tema 5. Prácticas de laboratorio	Nestas sesións levaranse a cabo experimentos relacionados cos temas anteriores. Síntese, purificación e caracterización de compostos orgánicos.
Tema 6. Prácticas de modelización molecular	Empregaranse as ferramentas da química computacional para estudar as propiedades de moléculas orgánicas e mecanismos de reacción relacionados cos temas anteriores.

Planificación

	Horas na aula	Horas fóra da aula	Horas totais
Actividades introdutorias	0	2	2
Flipped Learning	12	20	32
Resolución de problemas	24	44	68
Prácticas de laboratorio	28	10	38
Traballo tutelado	0	8	8
Resolución de problemas e/ou exercicios	2	0	2

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

Metodoloxía docente

	Descrición
Actividades introdutorias	Presentación da materia e o profesorado, revisión da guía docente e da estrutura do curso na plataforma de teledocencia.
Flipped Learning	Requírese a interacción do alumnado cos materiais postos á súa disposición a través da plataforma de teledocencia e a realización das actividades propostas para preparar as sesións presenciais. Na aula levaranse a cabo diversas actividades de consolidación, revisión, aclaración e aplicación dos conceptos estudados.

Resolución de problemas	Realizaranse exercicios prácticos de aplicación dos conceptos desenvolvidos nas sesións de aula invertida.
Prácticas de laboratorio	Posta en práctica no laboratorio das técnicas básicas de síntese, separación, purificación e determinación estrutural de compostos orgánicos. O traballo inclúe a avaliación de riscos, planificación dos experimentos e análise dos resultados. Empregaranse técnicas de modelización molecular para estudar as propiedades de compostos orgánicos e os mecanismos de reaccións seleccionadas. Para poder acceder ás sesións de prácticas requírese un traballo previo de preparación a través da plataforma de teledocencia. O traballo levarase a cabo de forma individual en sesións de 3.5 horas, e será documentado nun caderno de laboratorio. Tras as sesións de prácticas, elaborárase un traballo de acordo coas instrucións do profesorado.
Traballo tutelado	

Atención personalizada

Metodoloxías	Descrición
Flipped Learning	A avaliación continua proporciona tanto ó profesorado coma ó alumnado un rexistro da evolución da súa aprendizaxe ó longo do curso. Aínda que o profesorado pode tomar a iniciativa de propoñer sesións tutoriais se aprecia risco, recoméndase que o alumnado use esa información para identificar fortalezas e debilidades, organizar o seu traballo e buscar o apoio que precise. Para resolver calquera problema relacionado coa materia, aclarar dúbidas ou buscar axuda na realización das actividades propostas, o alumnado pode solicitar en calquera momento a atención do profesorado. As sesións de titorización poden levarse a cabo de forma presencial, no despacho dos profesores, ou ben a través do campus remoto, a demanda do alumno. Tamén se proporcionará atención personalizada a través do correo electrónico ou dos foros de discusión na plataforma de teledocencia.
Resolución de problemas	A resolución de problemas en grupos pequenos facilita a atención personalizada ó alumno no momento no que aparezan dificultades. Do mesmo xeito que no apartado anterior, proporcionarase atención personalizada en titorías a demanda, así como a través do correo electrónico ou os foros na plataforma de teledocencia.
Prácticas de laboratorio	Durante as prácticas, a maior parte dos problemas individuais resolverase directamente no laboratorio. Do mesmo xeito que no apartado anterior, proporcionarase atención personalizada en titorías a demanda, así como a través do correo electrónico ou os foros na plataforma de teledocencia.
Traballo tutelado	

Avaliación

	Descrición	Cualificación	Resultados de Formación e Aprendizaxe
Flipped Learning	O alumnado debe participar nas actividades realizadas na aula e interactuar cos contidos planificados na plataforma de teledocencia. Avaliarase o resultado dos tests e outras actividades de comprobación integradas en cada lección na plataforma.	10	A3 B3 C18 D3 A4 B4 C19
Resolución de problemas	Os alumnos deben resolver cuestións, problemas e exercicios, participando de forma activa nas sesións presenciais e completándoas con traballo autónomo. Realizaranse unha serie de entregas que serán avaliadas. Valorarase a adecuación das solucións propostas, a calidade da argumentación utilizada e a presentación da mesma.	15	A3 B3 C18 D3 A4 B4 C19
Prácticas de laboratorio	Avaliarase a adquisición das competencias asociadas ó manexo seguro de substancias químicas, á avaliación de riscos no laboratorio, á planificación e execución de experimentos (no laboratorio e computacionais) e á análise de resultados. Para iso, empregaranse a observación sistemática do traballo do alumno, o traballo previo ás sesións de laboratorio e a calidade do caderno de laboratorio. O traballo de laboratorio será cualificado como APTO ou NON APTO. A asistencia ás clases prácticas presenciais e a obtención dunha cualificación de APTO é obrigatoria para superar a materia. Un 10% da cualificación final está asociada á entrega dun traballo asociado ás prácticas.	10	
Traballo tutelado	Realizaranse ó longo do curso pequenos traballos en distintos formatos sobre os contidos da materia.	10	

Resolución de problemas e/ou exercicios	Realizaranse tres probas que consistirán na resolución de problemas e exercicios: 1. Unha proba sobre os primeiros temas da materia (2 horas) que suporá o 15% da cualificación final. 2. Unha proba final sobre todo o temario (2 horas) que suporá o 30% da cualificación final. Esixirase unha nota mínima de 4.0 puntos sobre 10 nesta proba para superar a materia. 3. Unha proba escrita (0.5 horas) relacionada coa parte experimental da materia, que suporá un 10% da cualificación final. Esixirase unha nota mínima de 4.0 puntos sobre 10 nesta proba para superar a materia.	55	A3 B3 C18 D3 A4 B4 C19 C27 C28
---	--	----	---

Outros comentarios sobre a Avaliación

Establécense unha serie de resultados de aprendizaxe esenciais que o estudantado debe demostrar ter adquirido de forma completa para superar a materia.

En caso de dúbida sobre a adquisición dos resultados de aprendizaxe do alumnado, pódese establecer a realización de probas orais adicionais ou complementarias ás probas escritas programadas.

CONDICIÓN DE PRESENTADO/A: A participación do/a 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, a entrega de traballos e exercicios encargados polo profesorado, ou a realización dalgunha proba.

ALUMNADO DE 2ª E POSTERIORES MATRÍCULAS: Ó/á estudante avaliado como APTO/A no traballo de laboratorio en cursos anteriores que así o solicite, outorgaráselle mención de APTO/A no seguimento do traballo de laboratorio, non sendo necesaria a súa asistencia ás sesións prácticas neste curso. Con todo, deberán realizar os entregables e a proba escrita da parte experimental para conseguir a cualificación correspondente á parte experimental da materia (20%) no curso académico actual.

AVALIACIÓN DA SEGUNDA CONVOCATORIA: Manterase a cualificación obtida polo alumnado durante o curso na parte de resolución de problemas, flipped learning, traballos tutelados e prácticas de laboratorio. Realizarase unha proba sobre todos os contidos teóricos da materia, que suporá un 45% da cualificación final e unha proba escrita sobre a parte experimental que suporá un 10% da cualificación final. Será necesario obter un mínimo de 4.0 puntos sobre 10 en cada unha destas probas para superar a materia e ter en conta o resto de elementos da avaliación.

OPCIÓN DE AVALIACIÓN NON CONTINUA: O alumnado que non desexa optar á avaliación continua deberá realizar as prácticas de laboratorio e obter una cualificación de APTO nas mesmas, ademais de obter unha cualificación superior a 5.0 puntos sobre 10 na proba escrita relativa á parte experimental da materia (un 20% da calificación). Aparte disto, deberá obter como mínimo unha cualificación de 5.0 puntos sobre 10 nunha única proba na que se avaliarán todos os contidos da materia (un 80% da calificación).

Bibliografía. Fontes de información

Bibliografía Básica

Eric V. Anslyn, Dennis A. Dougherty, **Modern physical organic chemistry**, University Science Books, 2006
Felix A. Carroll, **Perspectives on structure and mechanism in organic chemistry**, John Wiley, 2010
John Perkins, **Radical chemistry : the fundamentals**, Oxford University Press, 2000
Ian Fleming, **Pericyclic reactions**, Oxford University Press, 1999
Carol E. Wayne, Richard P. Wayne, **Photochemistry**, Oxford University Press, 1996
Steven M. Bachrach, **Computational organic chemistry**, John Wiley & Sons., 2007
James W. Zubrick, **The Organic Chem Lab Survival Manual: a student's guide to techniques**, John Wiley & Sons, 2009
Jerry R. Mohrig ... [et al.], **Laboratory techniques in organic chemistry : supporting inquiry-driven experiments**, W.H. Freeman, 2014

Bibliografía Complementaria

Nicholas J. Turro, V. Ramamurthy, J.C. Scaiano, **Modern molecular photochemistry of organic molecules**, University Science Books, 2010
Ernö Pretsch, Philippe Bühlmann, Martin Badertscher, **Structure determination of organic compounds : tables of spectral data**, Springer., 2009
Chemistry Libre Texts, **ChemistryLibre Texts**, [ookshelves/Organic_Chemistry,](https://www.masterorganicchemistry.com/)
James Ashenurst, **MasterOrganicChemistry**, <https://www.masterorganicchemistry.com/>,

Recomendacións

Materias que continúan o temario

Química orgánica IV: Deseño da síntese orgánica/V11G201V01310

Materias que se recomenda cursar simultaneamente

Química física III: Química cuántica/V11G201V01303

Materias que se recomenda ter cursado previamente

Determinación estrutural/V11G201V01206

Química orgánica I/V11G201V01205

Química orgánica II/V11G201V01210

Outros comentarios

Os obxectivos do curso implican aprender a manexar con soltura un bo número de conceptos novos nun período de tempo relativamente curto, polo que o traballo e estudo diarios son imprescindibles. O mesmo aplica á asistencia a clase e participación activa en todas as actividades propostas, incluíndo a interacción cos materiais que se poñen a disposición do alumnado a través da plataforma ou a lectura dos temas designados antes de cada sesión presencial.

Recoméndase fortemente ter aprobado previamente Química Orgánica I e II e Determinación Estrutural pois durante este curso farase uso constante dos conceptos traballados nesas materias.

Recoméndase a utilización de modelos moleculares, xa que unha das principais dificultades do curso é a visualización da estrutura tridimensional das moléculas.

Para as prácticas, son necesarios unha bata de laboratorio e un caderno.

DATOS IDENTIFICATIVOS				
Química analítica IV: Métodos cromatográficos e afíns				
Materia	Química analítica IV: Métodos cromatográficos e afíns			
Código	V11G201V01306			
Titulación	Grao en Química			
Descritores	Creditos ECTS	Sinale	Curso	Cuadrimestre
	6	OB	3	2c
Lingua de impartición	Castelán			
Departamento	Química analítica e alimentaria			
Coordinador/a	Gago Martínez, Ana			
Profesorado	Costas Rodríguez, Marta Estévez Bastos, Pablo Gago Martínez, Ana Leao Martins, Jose Manuel			
Correo-e	anagago@uvigo.es			
Web				
Descrición xeral	Coñecementos básicos sobre as técnicas de separación e a súa aplicación na análise química. Aplicacións xerais.			

Resultados de Formación e Aprendizaxe	
Código	
A1	Que os estudantes saiban aplicar os seus coñecementos ó seu traballo ou vocación dunha forma profesional e posúan as competencias que adoitan demostrarse por medio da elaboración e defensa de argumentos e a resolución de problemas dentro da súa área de estudo
A4	Que os estudantes poidan transmitir información, ideas, problemas e solución a un público tanto especializado coma non especializado
B5	Capacidade de adaptarse a novas situacións e adoptar decisións
C6	Coñecer os fundamentos e ferramentas habituais na resolución de problemas analíticos e na caracterización de substancias químicas
C26	Levar a cabo correctamente procedementos habituais no laboratorio, incluíndo o uso de instrumentación química estándar para o traballo sintético e analítico
D1	Capacidade para resolver problemas

Resultados previstos na materia				
Resultados previstos na materia	Resultados de Formación e Aprendizaxe			
Describir os fundamentos e principios da *cromatografía de gases, identificar e saber seleccionar detectores en función das aplicacións analíticas.	A1 A4	B5		D1
Describir os fundamentos da *cromatografía e os seus principios	A1 A4	B5	C6	D1
Describir os fundamentos e principios da *cromatografía de líquidos, identificar e saber seleccionar detectores en función das aplicacións analíticas.	A1 A4	B5	C6	D1
Describir os fundamentos e principios da *electroforesis *capilar, identificar e saber seleccionar detectores en función das aplicacións analíticas.	A1 A4	B5	C6	D1
Describir os fundamentos e principios dos axustes das diferentes técnicas de separación á *espectrometría de masas e as súas aplicacións na análise química.	A1 A4	B5	C6	D1
Aplicacións prácticas e de laboratorio das diferentes técnicas de separación no ámbito da análise ambiental, alimentos ou outras aplicacións	A1 A4	B5	C6 C26	D1

Contidos	
Tema	
1- Introducción á *cromatografía	Antecedentes, evolución, definicións e clasificación das técnicas *cromatográficas, principios da *cromatografía, parámetros *cromatográficos, aspectos cualitativos e cuantitativos
2 - *Cromatografía de gases	Introdución, Clasificación e compoñentes instrumentais. Detectores (principios e selección). Estratexias de preparación de mostra previos á análise *cromatográfico, optimizacións *cromatográficas, *calibración e medida. Aplicacións.

3- *Cromatografía de líquidos	Introdución, Clasificación e compoñentes instrumentais. Detectores (principios e selección). Estratexias de preparación de mostra previos á análise *cromatográfico, optimizacións *cromatográficas, *calibración e medida. Aplicacións.
4- *Electroforesis *capilar	Introdución, Clasificación e compoñentes instrumentais. Detectores (principios e selección). Estratexias de preparación de mostra previos á análise *electroforético, optimizacións *electroforéticas, *calibración e medida. Aplicacións.
5- *Espectrometría de masas	Principios e conceptos básicos da *espectrometría de masas. Principios da *ionización. Sistemas de *ionización. *Analizadores de masas. Espectros de masas: interpretación.
6- Técnicas axustadas	Introdución e principios do axuste *GC-*MS, *LC-*MS e CE-*MS. *Interfaces. Aplicacións

Planificación

	Horas na aula	Horas fóra da aula	Horas totais
Lección maxistral	24	21	45
Seminario	12	20	32
Prácticas de laboratorio	14	19	33
Obradoiro	0	22	22
Resolución de problemas e/ou exercicios	0	6	6
Exame de preguntas de desenvolvemento	2	10	12

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

Metodoloxía docente

	Descrición
Lección maxistral	As clases maxistras teñen unha duración de 50 minutos pretenden dar unha visión global e a nivel *introductorio sobre as técnicas de separación e a súa aplicación na análise. Os temas abordados nas clases teóricas poden estar acompañados de artigos científicos que poderán servir para ampliar os coñecementos abordados na clase teórica. A plataforma *Moodle utilizarase como ferramenta e recurso de comunicación entre o alumnado e os docentes.
Seminario	O obxectivo que se pretende alcanzar coa esta actividade pedagóxica é asentar os coñecementos e ampliar as competencias adquiridas nas clases maxistras, explorando. Tanto nos seminarios, talleres como actividades de laboratorio farase un seguimento do traballo individual e/ou colectivo que estea a realizar os estudantes. Os estudantes disporán dos medios facilitados para dita atención personalizada (*tutorías presenciais, foros na plataforma *Moodle, correo electrónico, etc.).
Prácticas de laboratorio	As sesións de laboratorio están orientadas á aprendizaxe dunha serie de técnicas *cromatográficas que permitan a identificación e cuantificación de *analitos en diferentes matrices (contaminantes ambientais e alimentos, aditivos en alimentos, residuos farmacéuticos, etc.). A partir de experimentos de laboratorio preténdese aproximar os conceptos das clases maxistras e casos prácticos dos seminarios á actividade práctica de laboratorio. Os estudantes deberán, de forma autónoma e en grupo, ser capaces de planificar e executar a actividade de laboratorio. A execución dos experimentos deberá ir acompañada con análises e organización datos. Cálculos, interpretación e discusión dos mesmos. Redacción adecuada e apropiada dos experimentos realizados.
Obradoiro	Formarían parte dunha actividade non presencial complementaria ás clases maxistras, seminarios e de laboratorio. Os estudantes deberán resolver por si mesmos de forma autónoma, individualmente e/ou en grupos, un traballo de investigación e/ou *monografía escrito de temas relacionados cos contidos da materia.

Atención personalizada

Metodoloxías	Descrición
Lección maxistral	As clases maxistras teñen unha duración de 50 minutos pretenden dar unha visión global e a nivel *introductorio sobre as técnicas de separación e a súa aplicación na análise. Os temas abordados nas clases teóricas poden estar acompañados de artigos científicos que poderán servir para ampliar os coñecementos abordados na clase teórica. A plataforma *Moodle utilizarase como ferramenta e recurso de comunicación entre o alumnado e os docentes.
Seminario	O obxectivo que se pretende alcanzar coa esta actividade pedagóxica é asentar os coñecementos e ampliar as competencias adquiridas nas clases maxistras, explorando. Tanto nos seminarios, talleres como actividades de laboratorio farase un seguimento do traballo individual e/ou colectivo que estea a realizar os estudantes. Os estudantes disporán dos medios facilitados para dita atención personalizada (*tutorías presenciais, foros na plataforma *Moodle, correo electrónico, etc.).

Prácticas de laboratorio As sesións de laboratorio están orientadas á aprendizaxe dunha serie de técnicas *cromatográficas que permitan a identificación e cuantificación de *analitos en diferentes matrices (contaminantes ambientais e alimentos, aditivos en alimentos, residuos farmacéuticos, etc.). A partir de experimentos de laboratorio preténdese aproximar os conceptos das clases maxistras e casos prácticos dos seminarios á actividade práctica de laboratorio. Os estudantes deberán, de forma autónoma e en grupo, ser capaces de planificar e executar a actividade de laboratorio. A execución dos experimentos deberá ir acompañada con análises e organización datos. Cálculos, interpretación e discusión dos mesmos. Redacción adecuada e apropiada dos experimentos realizados.

Probos	Descrición
Resolución de problemas e/ou exercicios	Formarían parte dunha actividade complementaria ás clases maxistras, seminarios e de laboratorio. Os estudantes deberán resolver por si mesmos de forma autónoma, individualmente e/ou en grupos, exercicios prácticos relacionados cos contidos da materia.
Exame de preguntas de desenvolvemento	O exame das preguntas de desenvolvemento terá unha duración máxima de tres horas. Nela inclúranse preguntas relacionados cos temas impartidos na materia.

Avaliación

	Descrición	Cualificación	Resultados de Formación e Aprendizaxe			
Seminario	Realizarase un seguimento do traballo individual e/ou colectivo desenvolvido polos estudantes, os cales disporán dos medios facilitados para unha atención personalizada (*tutorías presenciais, foros na plataforma *Moodle, correo electrónico, etc.). A nota mínima a alcanzar neste apartado deberá ser de 4 puntos (nunha cualificación global sobre 10)	25	A1	C6	D1	
Prácticas de laboratorio	Realizarase un seguimento do traballo individual e/ou colectivo do traballo desenvolvido en lle laboratorio podendo requirirse a presentación dun informe ou resolución de cuestións expostas no Laboratorio. A nota mínima a alcanzar neste apartado deberá ser de 4 puntos (nunha cualificación global sobre 10)	15	A1	C6	D1	C26
Resolución de problemas e/ou exercicios	Realizarase unha proba curta dunha hora de duración con data establecida no *cronograma definido pola Facultade. É unha proba de carácter non *eliminatorio e permite ao alumno facer o seu seguimento de estudo na materia. Os seus contidos estarán relacionados coa materia impartida na materia.	20	A1	C6	D1	
Exame de preguntas de desenvolvemento	O exame (proba longa), estará constituída por contidos impartidos nas clases maxistras, actividades desenvolvidas nos seminarios, talleres e laboratorio. Terá a duración de tres horas. É requisito alcanzar un valor mínimo de 4 puntos (nunha cualificación global sobre 10)	40	A1 A4	B5 C6 C26	D1	

Outros comentarios sobre a Avaliación

Dado que las actividades de formación y evaluación continua programadas dentro de las Prácticas de Laboratorio y del Estudio de casos (incluida en el seguimiento de la actividad de seminarios) están diseñadas para formar al alumnado en habilidades y competencias directamente relacionadas con el ejercicio de la profesión en el campo del Análisis Químico, por ello la asistencia y participación del alumnado en ambas actividades evaluables es OBLIGATORIA, de tal manera que la ausencia o no realización injustificada de estas actividades impedirá superar la materia. Por lo tanto, considerando el carácter teórico-práctico de la asignatura y los resultados de formación y aprendizaje que se persiguen alcanzar con ambas metodologías, el alumnado que opte por la Modalidad de Evaluación Global Final también deberá realizar OBLIGATORIAMENTE estas actividades.

Para SUPERAR la materia será necesario alcanzar una calificación GLOBAL FINAL de 5,0 (sobre 10), una vez sumadas las calificaciones ponderadas obtenidas en las componentes evaluables de la asignatura y descritas con detalle en esta sección de evaluación. Muy Importante, PARA PODER SUPERAR LA MATERIA (poder sumar las calificaciones obtenidas en cada actividad evaluable), es OBLIGATORIO alcanzar una nota mínima de 4,0 (sobre 10) en cada una de las actividades evaluables mencionadas anteriormente (Pruebas cortas, Prueba final, Prácticas de laboratorio y Seminarios). Los alumnos que no cumplan este requisito en la primera oportunidad, serán calificados en el acta con la nota más alta alcanzada en las partes suspensas, y deberán repetir en la segunda oportunidad (convocatoria de Julio) la prueba relativa a la parte o partes en las que no hayan alcanzado el 4,0. Lógicamente, los alumnos que se encuentren en esta situación conservarán la nota de la/s parte/s superada/s ($\geq 4,0$) en primera oportunidad.

En la segunda oportunidad de evaluación, tal como fue ya descrito, es OBLIGATORIO alcanzar como mínimo una calificación de 4.0 (sobre 10) en todas las partes objeto de recuperación.

Los alumnos que optan por la modalidad **evaluación global final**, deberán tener en cuenta que las actividades de contenido práctico (seminarios y Prácticas de laboratorio) son de carácter obligatorio, por lo que la evaluación de dichas actividades, se realizará independientemente de la evaluación final.

ATENCIÓN: El alumno que desee optar por la modalidad EVALUACIÓN FINAL deberá informar y entregar un documento escrito y firmado a los docentes responsables de la materia durante las dos primeras semanas desde el inicio de la docencia de la materia correspondiente.

En la presentación de la materia, así como en la pagina de la Facultad de Química disponen de las fechas para las actividades de evaluación.

Bibliografía. Fontes de información

Bibliografía Básica

Luis María Polo Díez, **Fundamentos de la cromatografía**, 1ª Ed., Dextra Editorial S.L, 2015

A. Braithwaite and J.F. Smith,, **Chromatographic Methods**,, 1ª Ed, Springer, Dordrecht, 1999

Phillipe Schmitt Kopplin, **Capillary Electrophoresis: Methods and Protocols**, 2ª Ed, Humana Press, 2016

Bibliografía Complementaria

Chhabil Dass,, **Fundamentals of Contemporary Mass Spectrometry**,, 1ª Ed., Wiley-Interscience,, 2010

Recomendacións

Materias que se recomienda cursar simultaneamente

Química analítica III: Métodos eletroanalíticos e separacións/V11G201V01302

Materias que se recomienda ter cursado previamente

Química analítica I: Principios de química analítica/V11G201V01202

Química analítica II: Métodos ópticos de análise/V11G201V01207

DATOS IDENTIFICATIVOS**Química física IV: Estrutura molecular y espectroscopia**

Materia	Química física IV: Estrutura molecular y espectroscopia			
Código	V11G201V01307			
Titulación	Grao en Química			
Descritores	Creditos ECTS	Sinale	Curso	Cuadrimestre
	6	OB	3	2c
Lingua de impartición	Castelán Galego			
Departamento	Química Física			
Coordinador/a	Flores Rodríguez, Jesús Ramón			
Profesorado	Flores Rodríguez, Jesús Ramón Giráldez Martínez, Jesús Mandado Alonso, Marcos			
Correo-e	flores@uvigo.es			
Web	http://https://moovi.uvigo.gal/			
Descrición xeral	Aplicase o Método Mecanocuántico ao estudo de moléculas e preséntanse os fundamentos teóricos da Espectroscopia Molecular, así como diversos aspectos experimentais. Introdúcese a aproximación de Born-Oppenheimer e descríbense as superficies de enerxía potencial. Desta forma, pode abordarse o estudo das espectroscopias de rotación e vibración-rotación. Preséntanse tamén os métodos básicos para o estudo da estrutura electrónica (Orbitais Moleculares e Enlace de Valencia), o que permite analizar a estrutura electrónica de moléculas sinxelas e introducir algúns conceptos fundamentais. Dispónse así dos elementos necesarios para estudar as espectroscopias electrónicas e fotoelectrónicas, por exemplo. Introdúcense os métodos computacionais fundamentais para o estudo da estrutura electrónica, proporcionándose, deste xeito, algúns elementos básicos da denominada Química Computacional. O desenvolvemento dos métodos espectroscópicos complétase cos fundamentos teóricos das espectroscopias de resonancia magnética e outras técnicas. Presentáronse tamén, de forma sucinta, outros métodos espectroscópicos, incluíndose algúns dos derivados do uso do láser. A formulación teórica da materia descansa nos fundamentos da Mecánica Cuántica, así como no desenvolvemento de modelos para o tratamento da translación, vibración e rotación, que se realiza en Química Física III: Química Cuántica. A introdución que se proporciona na devandita materia da Teoría de Grupos aplicada á simetría molecular, complétase no primeiro tema da presente. Empréganse elementos mecano-estadísticos para analizar, por exemplo, a intensidade e a anchura/forma das liñas espectrais. Polos seus contidos, tanto de carácter teórico como experimental, proporciona certo apoio ao desenvolvemento de Química Física V: Cinética Química.			

Resultados de Formación e Aprendizaxe

Código	
A1	Que os estudantes saiban aplicar os seus coñecementos ó seu traballo ou vocación dunha forma profesional e posúan as competencias que adoitan demostrarse por medio da elaboración e defensa de argumentos e a resolución de problemas dentro da súa área de estudo
A5	Que os estudantes desenvolvan aquelas habilidades de aprendizaxe necesarias para emprender estudos posteriores cun alto grao de autonomía
B1	Capacidade de aprendizaxe autónomo
B2	Capacidade de organización y planificación
B4	Capacidade de análise e síntese
C2	Empregar correctamente a terminoloxía química, nomenclatura, conversións e unidades
C4	Utilizar adecuadamente ferramentas informáticas para obter información, procesar datos, realizar cálculos computacionais e calcular propiedades da materia
C14	Coñecer os principios da mecánica cuántica e a súa aplicación na descrición da estrutura e as súas propiedades de átomos e moléculas
C15	Coñecer as principais técnicas de investigación estrutural, incluíndo a espectroscopia
D1	Capacidade para resolver problemas

Resultados previstos na materia

Resultados previstos na materia	Resultados de Formación e Aprendizaxe			
Aplicar a teoría de grupos de simetría no contexto da química	A1 A5	C4	D1	
Formular hamiltonianos moleculares tendo en conta a aproximación de Born-Oppenheimer e describir superficies de enerxía potencial.	A1 A5	B4 C2 C4 C14	D1	

Describir los métodos OM y EV y aplicar el método OM a moléculas sencillas.	A1 A5	B1 B2 B4	C2 C4 C14	D1
Describir y aplicar numéricamente métodos de cálculo para la estructura electrónica molecular.	A1 A5	B1 B2 B4	C2 C4 C14	D1
Aplicar conceptos básicos de espectroscopia molecular.	A1 A5	B1 B2 B4	C2 C4 C14 C15	D1
Interpretar distintos tipos de espectros moleculares (microondas, infrarrojo y visible-ultravioleta) para obtener información estructural.	A1 A5	B1 B2 B4	C2 C4 C14 C15	D1
Describir los fundamentos de las espectroscopías de resonancia.	A1 A5	B1 B2 B4	C2 C4 C14 C15	D1

Contidos

Tema

Tema I. La Teoría de Grupos en Química.	1. Representación matricial. 2. Tablas de caracteres. Degeneración. 3. Funciones de base. 4. Representación producto directo. 5. Anulación de integrales. 6. Combinaciones lineales adaptadas a simetría e operadores de proyección. 7. Teoría de Grupos e Química Cuántica.
Tema II. Estructura electrónica molecular I.	1. O hamiltoniano molecular: aproximación de Born-Oppenheimer. 2. Superficies de energía potencial. 3. A molécula-ión hidrógeno H ₂ ⁺ : método de orbitales moleculares (OM). 4. A molécula de hidrógeno: método de enlace de valencia (EV). 5. Comparación dos métodos OM e EV. 6. Limitacións da aproximación de Born-Oppenheimer.
Tema III. Estructura electrónica molecular II.	1. Configuraciones electrónicas y términos electrónicos en moléculas diatómicas. 2. Efecto de la interacción espín-órbita. 3. Densidad electrónica y polaridad de los enlaces. 4. Tratamiento OM y EV en moléculas diatómicas. 5. Moléculas poliatómicas: clasificación de los estados electrónicos. 6. Aplicación del método OM a moléculas poliatómicas sencillas. 7. Análisis de población electrónica. 8. Localización de orbitales moleculares. 9. Moléculas conjugadas: separación sigma-pi. Método OM del electrón libre. 10. Método OM de Hückel. 11. Deslocalización electrónica y aromaticidad. 12. Aplicación del método EV: tipos de hibridación. 13. Resonancia.
Tema IV. Estructura electrónica e Química Computacional.	1. O método Hartree-Fock SCF aplicado a moléculas. 2. Funciones de base en cálculos moleculares. 3. Ecuaciones de Roothaan-Hall e Pople-Nesbet. 4. Limitacións do método Hartree-Fock SCF. 5. Métodos post-Hartree-Fock. 6. Teoría de Funcional da Densidade (DFT). 7. La Relatividad en cálculos moleculares. 8. Métodos semi-empíricos.
Tema V. Interacción radiación materia e espectroscopía molecular.	1. Interacción radiación electromagnética-materia. 2. Difusión da radiación. 3. Absorción: Momentos de transición e reglas de selección. 4. A lei de Lambert-Beer. 5. Ensanche das liñas espectrales. 6. Efecto Raman. 7. Láser. 8. Transformada de Fourier. 9. Aspectos xerais das técnicas experimentais.

Tema VI. Rotación molecular e espectroscopias de rotación.	1. O rotor ríxido poliatómico: tratamento clásico e cuántico. 2. Espectros de rotación pura. 2.1. Regras de selección, poboacións e intensidade de las líneas 2.2. Efecto Stark. 2.3. Estrutura hiperfina e momento cuadrupolar nuclear. 2.4. Moléculas con momento angular electrónico non nulo. 2.5. Desdobramento tipo I.
Tema VII. Vibración molecular e espectroscopias de vibración.	3. Espectroscopia de microondas (MW) e as súas aplicacións. 4. Espectros Raman de rotación. 5. Determinación da xeometría molecular a partir das constantes de rotación. 6. Estatística de espín nuclear e estados de rotación.
Tema VIII. Espectros electrónicos.	1. Vibración en moléculas diatómicas. 2. Anarmonicidade, interacción vibración-rotación e distorsión centrífuga. 3. Espectros de vibración e vibración-rotación en moléculas diatómicas. 4. Intensidade das liñas e influencia do espín nuclear. 5. A vibración en moléculas poliatómicas. 6. Espectros de vibración e vibración-rotación en moléculas poliatómicas. 7. Análise baseada na simetría: actividade IR e Raman. 8. Superficies enerxía potencial e anarmonicidade. 9. Modos normais con máis dun mínimo.
Tema IX. Espectroscopias de resonancia.	1. Espectros electrónicos. 2. Moléculas diatómicas. 2.1 Regras de selección. 2.2 Principio de Franck-Condon e estrutura fina. 2.3 Disociación e predissociación. 3. Espectros electrónicos en moléculas poliatómicas. 4. Fluorescencia e fosforescencia. 5. Transicións non radiativas. 6. Espectroscopias fotoelectrónicas. 7. Moléculas ópticamente activas. 8. Técnicas láser.
	1. Introducción. 2. Fundamento das espectroscopias RMN e RSE. RMN: desprazamento químico. 3. Interpretación das constantes de apantallamento. 4. Interpretación da estrutura fina. 5. RMN e procesos de intercambio nuclear. 6. RMN para estado sólido. 7. Fundamento das técnicas de pulso e relaxación de espín. 8. Espectroscopia RSE: estrutura hiperfina. 9. Espectroscopia de resonancia de cuadrípulo nuclear. 10. Espectroscopia Mössbauer.

Planificación			
	Horas na aula	Horas fóra da aula	Horas totais
Lección maxistral	23	57.6	80.6
Resolución de problemas	12	26.4	38.4
Prácticas de laboratorio	14	14	28
Exame de preguntas obxectivas	2	0	2
Exame de preguntas obxectivas	1	0	1

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

Metodoloxía docente	
	Descrición
Lección maxistral	Exposición dos aspectos fundamentais de cada tema e formulación daqueles que van a desenvolverse nas clases de seminario mediante a realización de exercicios. Resposta ás cuestións puntuais que o alumnado expoña. Proporcionarase o material de estudo necesario para seguir as leccións mediante a plataforma Moovi (Moodle).
Resolución de problemas	Resolución de problemas numéricos e cuestións teóricas así como exercicios de tipo test. Os problemas e cuestións resolveranse, en principio, por parte do profesor, nos seminarios, coa participación do alumnado. Analizaranse e interpretaranse os resultados. De forma voluntaria, os alumnos poderán resolver os exercicios e presentalos no seminario, con axuda do profesor e a participación dos demais alumnos. Poderán, tamén de forma voluntaria, presentar a resolución escrita dun exercicio e debatela co profesor no horario de tutoría

Prácticas de laboratorio	Procurarase que cada alumno realice un conxunto equilibrado de experiencias que exemplifique e desenvolva os contidos fundamentais. Se levarán a cabo en parellas para unha maior axilidade no seu desenvolvemento. Proporcionarase guións completos, referencias de material bibliográfico e instrucións para o uso dos computadores, programas e aparellos de ser necesario, así como relativas á seguridade no laboratorio. O alumno ha de elaborar as gráficas e facer os cálculos necesarios para obter os resultados finais, así como analizar e discutir os mesmos.
--------------------------	--

Atención personalizada

Metodoloxías	Descrición
Lección maxistral	O estudante poderá expor dúbidas puntuais nas sesións así como outras máis amplas no horario de tutoría do profesor
Resolución de problemas	Discutirase cos alumnos a resolución dos exercicios propostos e analizaranse os resultados obtidos en conexión co desenvolvemento de aspectos teóricos. Responderase as cuestións adicionais que os estudantes poidan expor, no horario de tutoría do profesor.
Prácticas de laboratorio	Analizaranse co estudante, durante as sesións prácticas, as dúbidas ou problemas que poidan xurdir no referente ao seu fundamento teórico, ao seu desenvolvemento experimental e aos aspectos crave dos cálculos necesarios. Abordaranse cuestións adicionais no horario de tutorías.
Probas	Descrición
Exame de preguntas obxectivas	Aclararanse as dúbidas que poidan xurdir respecto da celebración das probas escritas, en particular as relativas ao seu alcance e configuración. Procurarase, no caso das probas curtas, discutir as solucións aos exercicios na seguinte clase de seminario. En horario de tutoría analizaranse co estudante, a petición súa, as respostas dadas por el/ela (revisión).

Avaliación

	Descrición	Cualificación	Resultados de Formación e Aprendizaxe			
Resolución de problemas	Voluntaria. Valorarase a resolución por parte do alumno dos exercicios propostos e a súa presentación nas clases de seminario. Realizaranse tamén exercicios tipo test. O peso na puntuación sitúase entre os límites 0-10%.	10	A1 A5	B1 B2 B4	C2 C4 C14	D1
Prácticas de laboratorio	Obrigatorias. Puntúanse pola valoración do seu desenvolvemento (5%) así como pola dos correspondentes informes de prácticas (15%), un por cada práctica realizada. Estes han de confeccionarse de forma individual, conter táboas, gráficas e os cálculos necesarios para a obtención dos resultados, así como unha análise dos mesmos. Deben entregarse no prazo que se estableza, a través da plataforma Moovi.	20	A1 A5	B1 B2 B4	C2 C4 C14	D1
Exame de preguntas obxectivas	No que se refire ás probas escritas, a materia divídese en dous partes (I e II) ás que corresponde un peso relativo do 50%. Consistirán na resolución de cuestións e problemas.	35	A1 A5	B1 B2 B4	C2 C14 C15	D1
Primeira Proba Curta (Parte I). Voluntaria. Recuperable no Exame. Terá lugar na metade do período de clases aproximadamente. Será liberatoria da materia avaliada, soamente se se alcánza ou supera a puntuación de 5 puntos sobre 10. De ser a puntuación inferior a 5 pero igual ou superior a 3.75, representará o 50% da nota da parte I, correspondendo o resto, á parte I do Exame, si iso conduce a unha cualificación máis alta; de non ser así prevalece a desta última. O seu peso na nota global depende do resultado doutros apartados e sitúase entre os límites: 0-40%.						

Exame de preguntas obxectivas	Segunda Proba Curta/Exame	35	A1 B1 C2 D1 A5 B2 C14 B4 C15
	Segunda Proba Curta (Parte II). Voluntaria. Recuperable no Exame. Non é liberatoria; a cualificación ten utilidade para realizar media coa parte II do Exame, non de forma independente. Terá lugar preto do final do período de clases. Suporá, en principio, un 25% da cualificación da parte II, pero de non conducir a unha media superior, prevalecerá a nota da parte II do Exame. O seu peso na nota global depende do resultado doutros apartados e sitúase entre os límites: 0-10%.		
	Exame. Obrigatorio. Realizarase a final do cuadrimestre, tras o período de clases (Maio o Xuño). Os estudantes que non superen a Primeira Proba Curta (non obteñan unha puntuación ≥ 5) deberán realizar todos os exercicios propostos. Aqueles que a superaron poderán realizar tamén, de forma voluntaria, os exercicios correspondentes á parte I para mellorar a súa cualificación. O seu peso na nota global depende do resultado doutros apartados e sitúase entre os límites: 26.25%-80%.		
	A cualificación combinada das probas escritas (non se inclúen os tests mencionados no primeiro apartado) ha de ser polo menos, 3.75 sobre 10 para que poida superarse a materia. Non pode superarse si non se realizan tanto as Prácticas de Laboratorio como o Exame. Véxanse tamén puntos segundo e terceiro do seguinte apartado		
	A avaliación de segunda oportunidade descríbese no primeiro punto do seguinte apartado.		

Outros comentarios sobre a Avaliación

- Na *evaluación de segunda oportunidade* (finais de Xuño ou principios de Xullo) os estudantes deberán realizar o correspondente Exame, de non ser así mantendrán a calificación da primeira oportunidade. A calificación global na segunda oportunidade non será inferior á da primeira. As Prácticas de Laboratorio teñen un peso do 20%. Poderán tenerse en conta as puntuacións correspondentes ao apartado de Resolución de Problemas, á segunda Proba Curta e tamén a da Primeira Proba Curta (no último caso soamente si é ≥ 3.75), nas proporcións establecidas anteriormente, si iso dá lugar a unha calificación combinada máis alta. De non ser así, a puntuación do Exame, calculada con todos os exercicios, prevalece e representa o 80% da cualificación global.
- A calificación combinada das probas escritas ha de ser polo menos 3.75 sobre 10 para que poida facerse media cos outros apartados da avaliación. A puntuación media global ha de ser de 5 puntos sobre 10 ou superior para superar a materia. Tanto as Prácticas como o Exame son obrigatorios.
- A realización de dúas ou máis tests, ou a presentación dun ou mais exercicios en clase de seminario (apartado de Resolución de Exercicios), realización de práctica, ou de calquera das probas curtas, fai imposible que a calificación sexa 'non presentado'.

Bibliografía. Fontes de información

Bibliografía Básica

Atkins, P.W.; de Paula, J.; Keeler, J., **Atkins Physical Chemistry**, 11th, Oxford University Press, 2018

Levine, I. N., **Physical Chemistry**, 6th ed., McGraw Hill, 2009

Bibliografía Complementaria

Levine, I. N., **Quantum Chemistry**, 7th, Pearson, 2014

Hollas, J.M., **Modern Spectroscopy**, 4th, Wiley, 2004

Levine, I.N., **Molecular Spectroscopy**, 1st ed., John Wiley & Sons, 1975

Banwell, C. N., **Fundamentals of Molecular Spectroscopy**, 4th, McGraw-Hill, 1994

Requena, A. ; Zúñiga, J., **Espectroscopía**, 1, Pearson, 2004

Gil Criado, M.; Núñez Barriocanal, J.L., **Espectroscopía Molecular**, 1, Garceta, 2018

Bernath, P.J., **Spectra of Atoms and Molecules**, 4th, Oxford University Press, 2020

Atkins, P. W. ; Friedman, R., **Molecular Quantum Mechanics**, 4th ed., Oxford University Press, 2005

Atkins, P. W., **Quanta : a handbook of concepts**, 2nd ed., Oxford University Press, 1991

Recomendacións

Materias que se recomienda cursar simultaneamente

Química física V: Cinética química/V11G201V01308

Materias que se recomienda ter cursado previamente

Química física I: Termodinámica química/V11G201V01203

Química física II: Superficies e coloides/V11G201V01208

Química física III: Química cuántica/V11G201V01303

DATOS IDENTIFICATIVOS				
Química física V: Cinética química				
Materia	Química física V: Cinética química			
Código	V11G201V01308			
Titulación	Grao en Química			
Descritores	Creditos ECTS	Sinale	Curso	Cuadrimestre
	6	OB	3	2c
Lingua de impartición	#EnglishFriendly Castelán			
Departamento	Química Física			
Coordinador/a	Bravo Díaz, Carlos Daniel			
Profesorado	Bravo Díaz, Carlos Daniel Cepero Rodríguez, Elizabeth Giráldez Martínez, Jesús Losada Barreiro, Sonia			
Correo-e	cbravo@uvigo.es			
Web				
Descrición xeral	(*) Los/as estudiantes internacionales podrán solicitar al profesorado: a) materiales y referencias bibliográficas para el seguimiento de la materia en inglés, b) atender las tutorías en inglés, c) pruebas y evaluaciones en inglés.			

Resultados de Formación e Aprendizaxe	
Código	
A1	Que os estudantes saiban aplicar os seus coñecementos ó seu traballo ou vocación dunha forma profesional e posúan as competencias que adoitan demostrarse por medio da elaboración e defensa de argumentos e a resolución de problemas dentro da súa área de estudo
A3	Que os estudantes teñan a capacidade de reunir e interpretar datos relevantes (normalmente dentro da súa área de estudo) para emitir xuízos que inclúan unha reflexión sobre temas relevantes de índole social, científica ou ética
A5	Que os estudantes desenvolvan aquelas habilidades de aprendizaxe necesarias para emprender estudos posteriores cun alto grao de autonomía
B1	Capacidade de aprendizaxe autónomo
B4	Capacidade de análise e síntese
C12	Coñecer a cinética do cambio químico, incluíndo a catálise e os mecanismos de reacción
C27	Demostrar capacidade para a observación, o seguimento e a medida dos procesos químicos, mediante o seu rexistro sistemático e fiable e a presentación de informes do traballo realizado
C28	Interpretar os datos derivados das observacións e medidas do laboratorio en termos do seu significado e relacionalos coa teoría adecuada
D1	Capacidade para resolver problemas

Resultados previstos na materia				
Resultados previstos na materia	Resultados de Formación e Aprendizaxe			
Nova	A1	B1	C12	D1
	A3	B4	C27	
	A5		C28	

Contidos	
Tema	
Termodinámica Estatística	Introdución á Termodinámica Estatística. Configuracións. Función de partición molecular. Colectivo canónico. Funcións termodinámicas. Constantes de equilibrio.
Teoría cinética dos gases	Fundamentos da teoría cinética dos gases. Colisións e superficies. Efusión.
Cinética formal.	Velocidade de reacción e ecuacións de velocidade. Ordes de reacción, molecularidade e tempos de vida media. Análise de datos. Análise cinético dalgunhas reaccións complexas. Mecanismos. Efectos da temperatura.
Métodos experimentais en *Cinética Química	Transformación das ecuacións de velocidade. Técnicas convencionais. Técnicas experimentais para o estudo de reaccións rápidas.
Interpretación teórica da velocidade de reacción.	Teoría de colisións para reaccións *bimoleculares. Teoría do estado de transición.
Catálisis	Mecanismo xeral da catálisis. Catálisis homoxénea. Catálisis acido-base. Catalisismo enzimático. Catálisis heteroxénea.
Cinética electrolítica	Interfase electrodo-disolución. Etapas dun proceso electrolítico. Células galvánicas. Sobrepotenciais. Ecuacións de Butler-Volmer e Tafel. Corrosión. Técnicas experimentais.

Planificación			
	Horas na aula	Horas fóra da aula	Horas totais
Lección maxistral	24	0	24
Seminario	12	60	72
Prácticas de laboratorio	14	11	25
Exame de preguntas obxectivas	2	16	18
Exame de preguntas de desenvolvemento	0	3	3
Resolución de problemas e/ou exercicios	0	6	6
Exame de preguntas de desenvolvemento	0	3	3

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

Metodoloxía docente	
	Descrición
Lección maxistral	Exposición por parte do profesor/a dos contidos sobre a materia obxecto de estudo, bases teóricas e/ou directrices dun traballo, exercicio que o/a estudante ten que desenvolver.
Seminario	Actividade enfocada ao traballo sobre un tema específico, que permite afondar ou complementar os contidos da materia. Pódese empregar como complemento das clases teóricas
Prácticas de laboratorio	Actividades de aplicación dos coñecementos a situacións concretas e de adquisición de habilidades básicas e **procedementais relacionadas coa materia obxecto de estudo. Desenvólvense en espazos especiais con equipamento especializado (Laboratorios, aulas informáticas, etc...)

Atención personalizada	
Metodoloxías	Descrición
Seminario	Resolución de dúbidas sobre as explicacións proporcionadas en clases. Estas consultas poderanse atender tamén por medios *telemáticos (correo electrónico, videoconferencia, foros de *FaiTIC, ...), previa solicitude a través dun correo electrónico.
Lección maxistral	Resolución de dúbidas sobre as explicacións proporcionadas en clases. Durante todo o período docente os alumnos poderán consultar todo tipo de dúbidas relacionadas coa materia. Estas consultas poderanse atender por medios *telemáticos (correo electrónico, videoconferencia, foros de *FaiTIC, ...), previa solicitude a través dun correo electrónico.
Prácticas de laboratorio	No horario de *Tutorías do profesor resolveranse de forma individualizada e máis persoal aquelas dúbidas dos alumnos que poidan xurdir ao longo do curso durante a realización das prácticas de laboratorio ou a elaboración dos correspondentes informes. Estas consultas tamén se poderán atender por medios *telemáticos (correo electrónico, videoconferencia, foros de *FaiTIC, ...), previa solicitude a través dun correo electrónico.
Probos	Descrición
Resolución de problemas e/ou exercicios	No horario de *Tutorías do profesor resolveranse de forma individualizada e máis persoal aquelas dúbidas dos alumnos que poidan xurdir ao longo do curso durante a realización das prácticas de laboratorio ou a elaboración dos correspondentes informes. Estas consultas tamén se poderán atender por medios *telemáticos (correo electrónico, videoconferencia, foros de *FaiTIC, ...), previa solicitude a través dun correo electrónico.
Exame de preguntas de desenvolvemento	O exame realizarase, no tempo que se estipule, sobre os contidos da materia e poderá *contener preguntas teóricas como prácticas (problemas).

Avaliación						
	Descrición	Cualificación	Resultados de Formación e Aprendizaxe			
Seminario	Exame / proba curta	15	A1	C12	D1	
			A5	C28		
Prácticas de laboratorio	Puntúase aquí, xunto co esforzo e a actitude, as destrezas e as competencias desenvolvidas polo alumno durante a realización das distintas prácticas. Tamén se valorará a calidade do resumo de cada unha das prácticas así como o da memoria que terá que entregar a o finalizar todas elas (memoria de prácticas).	15	A1	C12	D1	
			A3	C27		
			A5	C28		
	A entrega dos resumos a o finalizar cada práctica, a memoria de prácticas, e a asistencia as sesións de prácticas é OBRIGATORIA e, por tanto, non é posible aprobar a materia no caso de non haberse realizado alguna delas.					

Exame de preguntas de desenvolvemento	Exame de teoría - preguntas/cuestions de desenvolvemento	35	A1 A5	C12 C28	D1
Exame de preguntas de desenvolvemento	Examen práctico - desenvolvemento de exercicios que poden ser numéricos o teóricos	35	A1 A5	C12 C28	D1

Outros comentarios sobre a Avaliación

. Na data sinalada para os exames se realizarán dúas probas, unha teórica (35%) e outra práctica (exercios prácticos, 35%). Nos exames de segunda oportunidade e seguintes o profesor poderá optar por este esquema ou por outro conxunto, correspondendolle unha puntuación do 70% da nota global.

- Para os exames segunda oportunidade e seguintes, se manterán as notas do examen curto, as de prácticas e, no seu caso, as de avaliación continúa (a no ser que, no curso seguinte, se realicen de novo as prácticas). As notas de prácticas se poden manter en cursos posteriores se o alumno o solicita, tendo que repetirlas se no o fai.

- **A asistencia a prácticas, e a entrega dos correspondentes informes** (resumo de cada práctica e memoria da que se indique) **é OBRIGATORIA**. Unha falta sen xustificar suporá un suspenso directo na asignatura e ter que volver a realízalas o curso seguinte. Máis de tres (3) faltas xustificadas suporán o suspenso da asignatura e que se teñan que volver a realizar no curso seguinte.

A asistencia a clases maxistras e seminarios é moi recomendable.

A puntuación das prácticas terá que ser igual ou superior a 5.0 (escala 0-10). A **nota mínima REQUERIDA en cada un dos exames de desenvolvemento será de 3.8** (en escala 0-10) **para que poida facerse media coas puntuacións dos outros apartados**. Non hai nota mínima nos exames de control / probas curtas. Para aprobar a materia, a puntuación media global ha de ser, naturalmente, igual ou superior a 5.0 (escala 0-10).

Aínda que non existen puntuacións mínimas nalgúns apartados, na avaliación final valorarase especialmente a asistencia, presentación e a discusión de exercicios durante os seminarios e a actitude e traballo en prácticas.

Bibliografía. Fontes de información

Bibliografía Básica

I. N. Levine, **Química Física**,

P. W. Atkins, J. De Paula, **Physical Chemistry**, 10,

Bibliografía Complementaria

T. Engel, P. J. Reid, **Physical Chemistry**,

K. J.. Laidler, **Chemical Kinetics**,

S. Senent, **Química Física II, 3ª Ed.**,

M. E. Robson, **Chemical Kinetics**,

Recomendacións

Materias que se recomenda ter cursado previamente

Física: Física II/V11G201V01107

Matemáticas: Matemáticas II/V11G201V01108

Química física I: Termodinámica química/V11G201V01203

Química física II: Superficies e coloides/V11G201V01208

Química física III: Química cuántica/V11G201V01303

DATOS IDENTIFICATIVOS				
Química inorgánica IV: Metais de transición e estado sólido				
Materia	Química inorgánica IV: Metais de transición e estado sólido			
Código	V11G201V01309			
Titulación	Grao en Química			
Descritores	Creditos ECTS	Sinale	Curso	Cuadrimestre
	6	OB	3	2c
Lingua de impartición	Castelán			
Departamento	Química inorgánica			
Coordinador/a	García Fontán, María Soledad			
Profesorado	Carballo Rial, Rosa García Fontán, María Soledad			
Correo-e	sgarcia@uvigo.es			
Web				
Descrición xeral	A primeira parte da materia céntrase no estudo estrutural e na relación estrutura/propiedades dos sólidos inorgánicos. Na segunda parte da materia abórdanse os aspectos mais relevantes da Química dos Metais de transición e os seus derivados como son os compostos de coordinación. No laboratorio realizaranse experiencias de sínteses e caracterización de compostos de coordinación e de sólidos inorgánicos			

Resultados de Formación e Aprendizaxe

Código	
A2	Que os estudantes demostren posuír e comprender coñecementos nunha área de estudo que parte da base da educación secundaria xeral e adoita atoparse a un nivel que, malia se apoiar en libros de texto avanzados, inclúe tamén algúns aspectos que implican coñecementos procedentes da vangarda do seu campo de estudo
A3	Que os estudantes teñan a capacidade de reunir e interpretar datos relevantes (normalmente dentro da súa área de estudo) para emitir xuízos que inclúan unha reflexión sobre temas relevantes de índole social, científica ou ética
B1	Capacidade de aprendizaxe autónomo
B3	Capacidade de xestión da información
B4	Capacidade de análise e síntese
C8	Coñecer as propiedades características dos elementos e os seus compostos, incluíndo as relacións entre grupos e as súas variacións na táboa periódica
C9	Coñecer os aspectos estruturais dos elementos químicos e os seus compostos, incluíndo a estereoquímica
C26	Levar a cabo correctamente procedementos habituais no laboratorio, incluíndo o uso de instrumentación química estándar para o traballo sintético e analítico
D2	Capacidade para traballar en equipo

Resultados previstos na materia

Resultados previstos na materia	Resultados de Formación e Aprendizaxe			
Recoñecer e predecir os principais tipos estruturais de sólidos e as súas implicacións nas propiedades físicas e químicas	A2 A3	B1 B3 B4	C8	
Enumerar y reconocer os tipos de defectos en cristais e o seu efecto sobre as propiedades do sólido.	A2		C9	
Identificar os compuestos non estequiométricos	A2		C9	
Recoñecer o efecto da adición de impurezas sobre a cor e as propiedades ópticas de algúns sólidos inorgánicos.	A3	B3	C9	
Identificar os principais métodos de preparación de sólidos inorgánicos.	A3		C8	
Describir cómo se poden obter os metais de transición a partir dos seus recursos naturais e diferenciar o comportamento entre os elementos da primeira, segunda e terceira serie de transición.	A2 A3	B3 B4	C8 C9	
Predecir a reactividade dos óxidos e haluros metálicos e dos compuestos de coordinación baseándose no enlace e no estado de oxidación do metal.	A2 A3	B3 B4	C8 C9	
Racionalizar a estabilidade termodinámica dos compostos de coordinación en función do estado de oxidación do metal y do tipo de ligando.	A2 A3	B3 B4	C8 C9	
Levar a cabo no laboratorio a preparación, caracterización e estudo dalgúns compostos físicos e químicos dos principais tipos estruturais de sólidos así como de outros derivados dos metais de transición.	A2 A3	B3 B4	C8 C9 C26	D2

Contidos	
Tema	
Tema 1. Introducción e fundamentos.	Importancia tecnolóxica dos sólidos . Clasificación de sólidos. Formulación de sólidos inorgánicos incorporando información estrutural. Polimorfismo, pseudomorfismo, politipismo
Tema 2. Racionalización estrutural	Empaquetamento de esferas. Representacións poliédricas Regras de Pauling. Regra da conectividade
Tema 3. Estrutura dos sólidos	Principais tipos estruturais e a súa implicación na xeración de propiedades útiles dos sólidos
Tema 4. Cristais perfectos e imperfectos e as súas propiedades	Tipos de defectos Defectos puntuais. Consecuencias da presenza de defectos nas propiedades dos sólidos. Condutividade. Propiedades ópticas.
Tema 5. Métodos de preparación de sólidos	Método cerámico. Química branda. Síntese en altas presión. Formación de sólidos a partir de gases e de líquidos.
Tema 6: Química dos metais dos grupos 3 e 4.	Obtención e usos. Estados de oxidación máis frecuentes. Compostos representativos do titanio: haloxenuros, óxidos e óxidos mixtos. Compostos de coordinación.
Tema 7: Química dos metais do grupo 5.	Obtención e usos. Estados de oxidación máis frecuentes. Compostos representativos do vanadio: haloxenuros, óxidos e oxoanións. Compostos de coordinación.
Tema 8: Química dos metais do grupo 6.	Obtención e usos. Estados de oxidación máis frecuentes. Compostos representativos do cromo: haloxenuros, óxidos e oxoanións. Compostos de coordinación.
Tema 9: Química dos metais do grupo 7.	Obtención e usos. Estados de oxidación máis frecuentes. Compostos representativos do manganeso: haloxenuros, óxidos e oxoanións. Compostos de coordinación. Bioinorgánica do manganeso e tecnecio
Tema 10: Química dos metais do grupo 8.	Obtención e usos. Estados de oxidación máis frecuentes. Compostos representativos do ferro: óxidos e óxidos mixtos. Compostos de coordinación. Bioinorgánica do ferro.
Tema 11: Química dos metais do grupo 9.	Obtención e usos. Estados de oxidación máis frecuentes. Compostos representativos do cobalto: haloxenuros e óxidos. Compostos de coordinación. Bioinorgánica do cobalto.
Tema 12: Química dos metais do grupo 10.	Obtención e usos. Estados de oxidación máis frecuentes. Compostos representativos do níquel: haloxenuros e óxidos e compostos de coordinación. Bioinorgánica do platino.
Tema 13: Química dos metais do grupo 11.	Obtención e usos. Estados de oxidación máis frecuentes. Compostos representativos do cobre: haloxenuros e óxidos e compostos de coordinación. Bioinorgánica do cobre e ouro.
Prácticas de Química dos compostos de metais de transición (4 sesións)	Preparación e caracterización de compostos de metais do bloque d
Prácticas de sólidos inorgánicos (4 sesións)	Preparación e estudo das propiedades dalgúns sólidos inorgánicos.

Planificación			
	Horas na aula	Horas fóra da aula	Horas totais
Lección maxistral	24	31	55
Prácticas de laboratorio	28	14	42
Seminario	12	12	24
Exame de preguntas obxectivas	2	9	11
Exame de preguntas obxectivas	0	18	18

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

Metodoloxía docente	
	Descrición
Lección maxistral	As clases teóricas adicaránse a presentar os aspectos fundamentais dos temas.
Prácticas de laboratorio	Realizaranse prácticas de laboratorio nas que se aplicarán os coñecementos teóricos adquiridos. As prácticas realizaranse en 8 sesións de 3,5 horas e os alumnos deberán reflectir e interpretar o observado no correspondente caderno de laboratorio.
Seminario	As clases de seminario adicaranse á resolución de casos prácticos relacionados coa materia así como á resolución de dúbidas ou cuestións que surxan no desenvolvemento de cada tema. Contemplase tamén realizar seminarios nos que se abordarán aspectos non impartidos en materias anteriores pero necesarios para a marcha do curso.

Atención personalizada

Metodoloxías	Descrición
Lección maxistral	Durante todo o período docente os/as estudantes poderán consultar todo tipo de dúbidas da materia en horario de tutorías ou previa cita.
Prácticas de laboratorio	Durante todo o período docente os/as estudantes poderán consultar todo tipo de dúbidas da materia en horario de tutorías ou previa cita
Seminario	Durante todo o período docente os/as estudantes poderán consultar todo tipo de dúbidas da materia en horario de tutorías ou previa cita.

Avaliación

	Descrición	Cualificación	Resultados de Formación e Aprendizaxe
Prácticas de laboratorio	A asistencia ás clases prácticas presenciais é obrigatoria. A avaliación nas prácticas de laboratorio constará dun 10% de resolución de cuestións sinxelas e un 5% baseado no comportamento e destreza por observación directa do/a profesor/a. A puntuación soamente será considerada na proba longa conséguese unha cualificación igual ou superior a 3 puntos sobre 10.	15	A2 B3 C8 D2 A3 B4 C9 C26
Seminario	Nas sesións de seminario pediráselles aos/*as estudantes a resolución de cuestións sinxelas que deberán entregar nese momento e que servirán para a súa avaliación. A puntuación soamente será considerada si na proba longa conséguese unha cualificación igual ou superior a 3 puntos sobre 10.	15	B1 C8 B3 C9 B4
Exame de preguntas obxectivas	Haberá dúas probas curtas no cuadrimestre onde se avaliarán as competencias relacionadas cos temas. A puntuación soamente será considerada na proba longa si conséguese unha cualificación igual ou superior a 3 puntos sobre 10. A data e hora de realización é público e consta na programación académica aprobada na Xunta de Facultade correspondente.	30	B3 C8 B4 C9
Exame de preguntas obxectivas	Haberá unha proba final na que se fará unha avaliación global da materia. A puntuación da proba soamente será considerada si conséguese na proba de *formulación un 9 sobre 10. A data e hora de realización é público e consta na programación académica aprobada na Xunta de Facultade correspondente.	40	B3 C8 B4 C9

Outros comentarios sobre a Avaliación

Condicións para optar á avaliación continua

- O estudante ten que obrigatoriamente asistir a todas as clases teóricas e seminarios. - O estudante ten que obrigatoriamente asistir a todas as clases prácticas de laboratorio.- O profesor/a debea dispor en tempo e forma dun mínimo 80% dos entregables propostos nas distintas actividades presenciais (exercicios en clases teóricas e seminarios ou exercicios de traballo autónomo) ao final do curso.- É tamén obrigatorio que o estudante preséntese a todas as probas escritas planificadas. O incumprimento de calquera de destas condicións implica a perda de dereito a avaliación continua.

Desarrollo para optar á avaliación continua:- As competencias específicas da materia relacionadas coas competencias da titulación (CE8, CE9 e CE26) avalíaranse de forma explícita en exercicios na aula e probas escritas. As competencias básicas, xerais e transversais serán avaliadas de forma implícita na cualificación dos exercicios.-Sera necesario obter na a proba de formulación un 9 sobre 10 para superar a materia.- Será necesario unha puntuación superior ou igual ao 30% do valor total en cada unha das probas escritas (curtas e final) e na suma total das cualificacións dos entregables así como dun 50% das prácticas de laboratorio para que na cualificación final téñase en conta o resto dos elementos de avaliación (entregables e probas curtas). No caso de non conseguir algún dos mínimos, no acta figurará o resultado ponderado das probas e exercicios cualificados nos que se conseguiu o criterio.

2ª Convocatoria

- Os alumnos/as que non superen a materia ao final do cuadrimestre deberán facer unha proba escrita no período de peche de avaliación definitivo no mes de xullo. Devandita proba terá un valor do 40% da nota e substituirá os resultados da proba do final de cuadrimestre. A cualificación dos entregables (das actividades presenciais) e probas curtas non son recuperables.- A cualificación final das/ os estudantes, de ser superior a 7 puntos sobre 10, poderá ser normalizada de forma

que a cualificación máis alta podra ser até 10 puntos.

No caso de non cumprir os requisitos para avaliación continua ou ben escolla a avaliación global, o/a estudante poderá presentarse a unha avaliación global ao final do cuadrimestre onde deberá resolver cuestións relacionadas con todas as competencias específicas da materia (incluída a CE26). En cada pregunta ou cuestión, identificarase a competencia que se está avaliando. Esta proba será diferente en extensión á realizada por aqueles que opten por avaliación continua. Nese caso:- Será necesario obter un mínimo de 3 puntos sobre 10 de media na avaliación das competencias CE8 e CE9 e de 5 na competencia CE26 para superar a materia.- Será necesario obter na a proba de formulación un 9 sobre 10 para superar a materia.- Será necesario obter unha cualificación global igual ou superior a 5 sobre 10 nesta pruebapara superar a materia e en ningún caso terase en conta as cualificacións anteriores obtida durante o cuadrimestre.- A cualificación non se verá afectada pola normalización aplicada de ser superior a 7 puntos.- O estudante ten que obrigatoriamente asistir a todas as clases teóricas e seminarios. - O estudante ten que obrigatoriamente asistir a todas as clases prácticas de laboratorio.

Bibliografía. Fontes de información

Bibliografía Básica

A. R. West, **Solid State Chemistry and its applications**, 2, Wiley, 2014

L. Smart, E. Moore, **Solid State Chemistry. An introduction**, CRC, 2012

C. E. Housecroft y A. G. Sharpe., **Inorganic Chemistry**, 5, Pearson, 2018

Bibliografía Complementaria

Winter, Mark J., **D-block chemistry, 1994**, Oxford University Press, 1994

Atkins, Peter, **Inorganic Chemistry**, Willey-VCH, 2008

N.N. GREENWOOD , A. EARNSHAW, **Chemistry of the Elements**, 2, Butterwoth Heinemann, 1997

Recomendacións

Materias que se recomenda ter cursado previamente

Determinación estrutural/V11G201V01206

Química inorgánica I/V11G201V01204

Química inorgánica II/V11G201V01209

Química inorgánica III: Química de coordinación/V11G201V01304

Outros comentarios

Materias que continúan o temario:

Química de materiais.

Química Organometálica

DATOS IDENTIFICATIVOS**Química orgánica IV: Deseño da síntese orgánica**

Materia	Química orgánica IV: Deseño da síntese orgánica			
Código	V11G201V01310			
Titulación	Grao en Química			
Descritores	Creditos ECTS	Sinale	Curso	Cuadrimestre
	6	OB	3	2c
Lingua de impartición	#EnglishFriendly Castelán			
Departamento	Química orgánica			
Coordinador/a	Álvarez Rodríguez, Rosana			
Profesorado	Álvarez Rodríguez, Rosana Gómez Pacios, María Generosa Rodríguez de Lera, Angel Sánchez Sanz, Irene			
Correo-e	rar@uvigo.es			
Web				
Descrición xeral	Nesta materia integraranse todos os coñecementos previos sobre materias de Química Orgánica, en particular no que se refire á síntese orgánica e as súas consecuencias na creación de novos elementos. estereoxénico. Para iso, faranse uso das ferramentas de análise retrosintética, con especial atención á análise de propostas sintéticas que pasan con selectividade (químio, rexio e estereoselectividade).			
	Programa English Friendly: Os estudantes estranxeiros poderán solicitar ao profesorado: a) material e referencias bibliográficas para o seguimento da materia en inglés, b) asistir a titorías en inglés, c) probas e avaliacións en inglés.			

Resultados de Formación e Aprendizaxe

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
B3	Capacidade de xestión da información
B4	Capacidade de análise e síntese
C15	Coñecer as principais técnicas de investigación estrutural, incluíndo a espectroscopia
C19	Coñecer as principais rutas de síntese na química orgánica, incluíndo as interconversións de grupos funcionais e a formación dos enlaces carbono-carbono e carbono-heteroátomo
C27	Demostrar capacidade para a observación, o seguimento e a medida dos procesos químicos, mediante o seu rexistro sistemático e fiable e a presentación de informes do traballo realizado
C28	Interpretar os datos derivados das observacións e medidas do laboratorio en termos do seu significado e relacionalos coa teoría adecuada
D2	Capacidade para traballar en equipo

Resultados previstos na materia

Resultados previstos na materia	Resultados de Formación e Aprendizaxe		
Recoñecer os elementos estruturais nas moléculas orgánicas	A3	B3	C19
	A5	B4	C28
Propoñer as secuencias retrosintéticas das moléculas propostas	A3	B3	C19
	A5	B4	C28
Analizar propostas resintéticas alternativas	A3	B3	C19
	A5	B4	C28
Deseño de secuencias sintéticas de moléculas obxectivo que transcurran con selectividade	A3	B3	C19
	A5	B4	C28
Valorar o emprego de transformacións eficientes de simplificación estrutural	A3	B3	C19
	A5	B4	C28
Manexar as interconversións entre grupos funcionais e os grupos protectores	A3	B3	C19
	A5	B4	C28
Coñecer as reaccións que teñan lugar con selectividade e os seus mecanismos	A3	B3	C19
	A5	B4	C28

Aplicar no laboratorio, de xeito riguroso, as normas de seguridade e hixiene, así coma o tratamento axeitado dos residuos	A3		C15 C27 C28	D2
Recoller na libreta de laboratorio, co xeito correcto e rigurosidade, os experimentos feitos		B4	C27 C28	
Realizar a síntese dunha molécula orgánica empregando unha síntesis selectiva e por etapas	A3 A5	B3 B4	C15 C27 C28	D2

Contidos

Tema

1. Deseño da síntese orgánica. Análise retrosintético.	1.1. Síntese orientada a obxectivos 1.2. Os principios da análise retrosintética 1.3. Criterios de selección de enlaces estratéxicas 1.4. Principios xerais de reactividade. Polaridade natural y no natural 1.5. Selectividade. Conceptos básicos 1.6. Estratexias retrosintéticas
2. Estratexia baseada nas transformas I. Criterios de selección de desconexións	2.1.. Desconexións C-X de compostos monofuncionais 2.2. Desconexións C-X de compostos difuncionais (1, n) 2.3. Desconexións C-C de compostos monofuncionais 2.4. Desconexións C-C de compostos difuncionais (1, n) 2.5. Desconexións de compostos aromáticos
3. Estratexia baseada nos grupos funcionais I. Interconversión	3.1. Interconversión de grupos funcionais. Niveis de oxidación 3.2. Reaccións de interconversión do grupo funcional 3.3. Reaccións de oxidación 3.4. Reaccións de redución
4. Estratexia baseada nos grupos funcionais II. Grupos protectores na síntese orgánica	4.1. Descrición dos grupos protectores. 4.2. Sensible ao medio ácido, axentes básicos, fluoruros, oxidantes e axentes redutores. 4.3. Selección de grupos protectores
5. Estratexia baseada nas transformas II. Desconexión de compostos insaturados	5.1. Síntese estereoselectiva de olefinas. Desconexións Csp ² =Csp ² . 5.2. Reaccións catalizadas polo paladio. Desconexións Desconexiones Csp ² -Csp ² , Csp ² -Csp, Csp-Ar y Ar-X (X = O, N).
6. Estratexia baseada na estereoquímica	6.1. Descrición da estereoquímica. Quiralidade e descritores. Topicidade 6.2. Estereoquímica nas reaccións químicas. Selectividade de produto. Diastereoselectividade sinxela e inducida.
7. Estratexias baseada na topoloxía molecular. Desconexión de compostos cíclicos	7.1. Análise retrosintética mediante estratexias topolóxicas 7.2. Retrosíntese de aneis aillados 7.3. Retrosíntese de aneis espiro 7.4. Retrosíntese de aneis fusionados 7.5. Retrosíntese de aneis mais complexos
O desafío sintético do deseño e descubrimento de compostos orgánicos con aplicacións terapéuticas.	4 sesións

Planificación

	Horas na aula	Horas fóra da aula	Horas totais
Lección maxistral	24	24	48
Seminario	24	24	48
Prácticas de laboratorio	14	16	30
Exame de preguntas de desenvolvemento	2	10	12
Exame de preguntas de desenvolvemento	2	10	12

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

Metodoloxía docente

	Descrición
Lección maxistral	O material da materia atoparase na plataforma Moovi
	O profesorado expoñerá, de maneira clara, os aspectos mais importantes da materia de cada sesión maxistral.

Seminario	Os aspectos comentados durante as sesións maxistrais, traballaranse resolvendo problemas e exercicios formulados polos profesores. Ademais, a través da plataforma Moovi, os estudantes terán a oportunidade de traballar a materia resolvendo problemas e exercicios adicionais que serán avaliados.
Prácticas de laboratorio	O traballo de laboratorio desenvolverase en 4 sesións de 3,5 horas. Durante a execución da síntese deberán escribir, con rigurosidade e claridade, o caderno de laboratorio, que entregarse ao final das prácticas e as cuestións plantexadas polo supervisor. Ademais, os alumnos farán un cuestionario empregando a plataforma Moovi, sobre unha serie de preguntas sobre o traballo experimental feito.

Atención personalizada

Metodoloxías	Descrición
Lección maxistral	O profesorado dedicará o tempo necesario para responder ás preguntas dos alumnos relacionado coa materia
Seminario	O profesorado dedicará o tempo necesario para responder ás preguntas dos estudantes sobre os exercicios e problemas resoltos nas sesións do seminario, así como os propostos na Plataforma Moovi
Prácticas de laboratorio	O profesorado dedicará o tempo necesario para responder ás preguntas dos alumnos relacionado co desenvolvemento da síntese da molécula obxectivo que se fará no laboratorio. Durante as sesións de laboratorio, o profesorado supervisará o desenvolvemento dos experimentos propostos polos estudantes así como o cumprimento das medidas de seguridade e hixiene.
Probos	Descrición
Exame de preguntas de desenvolvemento	
Exame de preguntas de desenvolvemento	

Avaliación

	Descrición	Cualificación	Resultados de Formación e Aprendizaxe
Seminario	Valorarase a resolución de exercicios e problemas adicionais, semellantes aos feitos durante as sesións do seminario, e que farasen a través da plataforma Moovi. Resultado da aprendizaxe: - Recoñecer elementos estruturais en moléculas orgánicas. - Propoñer secuencias retrosintéticas das moléculas propostas - Analizar propostas retrosintéticas alternativas. - Deseñar secuencias sintéticas de moléculas obxectivo que trascorren con selectividade. - Avaliar o uso de transformacións de simplificación estrutural eficientes. - Xestionar correctamente as interconversións entre grupos funcionais e os grupos protectores. - Coñecer as reaccións que poden proporcionar selectividade e os súas mecanismos	15	A3 B3 C15 A5 B4 C19

Prácticas de laboratorio	1. É obrigatorio realizar as prácticas de laboratorio, así coma seguir as normas de hixiene e seguridade no laboratorio e a recollida de residuos para obter a condición de APTO. 2. Ademias, valorarase: 2.1. O caderno de laboratorio (20% da nota de prácticas), análise estrutural da molécula obxectivo (25% da nota de prácticas), fichas de riesgos (10% da nota de prácticas) e resolución das cuestións plantexadas así coma o uso da nomenclatura IUPAC (15% da nota de prácticas) 2.2. Resolución dunha serie de preguntas sobre o traballo experimental, feito no laboratorio. Realizarase a través da plataforma Moovi (10%) 3. E necesario obter a condición de APTO en cada una de las partes.	25	A3 B3 C15 D2 A5 B4 C19 C27 C28
Resultado da aprendizaxe: todos			
Exame de preguntas de desenvolvemento	Realizaranse ao longo da materia dúas probas curtas (1h de duración; 10% cada unha delas) Resultado da aprendizaxe: - Recoñecer elementos estruturais en moléculas orgánicas. - Propoñer secuencias retrosintéticas das moléculas propostas -Analizar propostas retrosintéticas alternativas. - Deseñar secuencias sintéticas de moléculas obxectivo que trascorren con selectividade. - Avaliar o uso de transformacións de simplificación estrutural eficientes. - Xestionar correctamente as interconversións entre grupos grupos funcionais e os grupos protectores. - Coñecer as reaccións que poden proporcionar selectividade e os súas mecanismos	20	
Exame de preguntas de desenvolvemento	Realizaranse ao longo da materia unha longa proba escrita (2h de duración; 40%) Para aprobar a materia, os estudantes deben obter un mínimo do 50% en todas as probas escritas (proba de resposta curta e resposta longa). Polo tanto, a cualificación das seccións restantes só se engadirán cando a puntuación obtida na suma das probas escritas sexa igual ou superior a tres puntos. Resultado da aprendizaxe: - Recoñecer elementos estruturais en moléculas orgánicas. - Propoñer secuencias retrosintéticas das moléculas propostas -Analizar propostas retrosintéticas alternativas. - Deseñar secuencias sintéticas de moléculas obxectivo que trascorren con selectividade. - Avaliar o uso de transformacións de simplificación estrutural eficientes. - Xestionar correctamente as interconversións entre grupos grupos funcionais e os grupos protectores. - Coñecer as reaccións que poden proporcionar selectividade e os súas mecanismos	40	

Outros comentarios sobre a Avaliación

1. A participación dos alumnos nalgunha das actividades de avaliación da materia implicará que adquieran a condición de presentado/a, polo tanto, terán unha nota.
2. Considéranse actividades de avaliación: asistencia a sesións de laboratorio, realización de probas curtas e entrega dun mínimo do 25% dos exercicios propostos a través da plataforma Moovi.
3. Ademais, os alumnos poderán escoller ser avaliados mediante **unha proba única**, o final do cuatrimestre, e renunciar a avaliación continua. Para elo, terán que comunicalo, por escrito, o coordinador da materia o inicio do cuatrimestre (tres primeiras semáns). Nesta caso, a nota final será un máximo de 2.5 puntos das prácticas de laboratorio e un máximo de 7.5

puntos da proba escrita.

Avaliación da convocatoria de Xuño: Para superar a materia os alumnos teñen que obter unha nota igual o superior a 5 puntos, tanto na parte práctica coma nas probas escritas.

Avaliación da convocatoria de Xullo:

1. Puntuación obtida polos alumnos/as durante o curso: máximo 4 puntos (2.5 puntos as prácticas de laboratorio; 1.5 puntos os exercicios).

2. Proba escrita: máximo 6 puntos. A nota acadada no examen de Xullo substituirá as notas das probas escritas.

Información adicional:

1. Os alumnos que acadaran a condición de apto nas prácticas de laboratorio, no curso anterior, non terán que relaizar de novo o traballo do laboratorio.

2. A identificación de erros conceptuais graves, suporá a asignación de novas actividades orientadas a resolver, o mais axiña posible, os problemas de aprendizaxe. Estas actividades serán avaliadas como parte do 15% correspondentes os seminarios.

3. Para a realización das prácticas recomendase a asistencia as tutorías para correcta organización do traballo experimental.

Bibliografía. Fontes de información

Bibliografía Básica

Clayden, J.; Greeves, N.; Warren, S., **Organic Chemistry**, 2nd, Oxford University Press, 2012

Starkey, S., **Introduction to strategies for organic synthesis**, 1119347246, 2nd, Wiley, 2018

Bibliografía Complementaria

Warren, S.; Wyatt, P., **Organic Synthesis the Disconnection Approach**, 2nd, Wiley, 2011

Sunjic, V.; Perokovic, V. P., **Organic Chemistry from Retrosynthesis to Asymmetric Synthesis**, 1st, Springer, 2016

Recomendacións

Materias que se recomenda ter cursado previamente

Química: Laboratorio de química I/V11G201V01105

Química: Laboratorio de química II/V11G201V01110

Química: Química I/V11G201V01104

Química: Química II/V11G201V01109

Determinación estrutural/V11G201V01206

Química orgánica I/V11G201V01205

Química orgánica II/V11G201V01210

Química orgánica III: Reaccións concertadas, radicalarias e fotoquímicas/V11G201V01305
