



Facultad de Química

Presentación

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



Titulaciones impartidas en el centro

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

Servicios del centro

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

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

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

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

Página web

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

<http://quimica.uvigo.es>

Asignaturas

Curso 2

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

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

Competencias	
Código	
C3	Demostrar conocimiento y comprensión de hechos esenciales, conceptos, principios y teorías en: principios de la mecánica cuántica y su aplicación en la descripción de la estructura y las propiedades de átomos y moléculas
C14	Demostrar conocimiento y comprensión de hechos esenciales, conceptos, principios y teorías en: relación entre propiedades macroscópicas y propiedades de átomos y moléculas individuales, incluyendo las macromoléculas
C19	Aplicar dicho conocimiento y comprensión a la resolución de problemas cuantitativos y cualitativos de naturaleza básica
C20	Evaluar, interpretar y sintetizar datos e información química
C22	Procesar datos y realizar cálculo computacional relativo a información y datos químicos
C23	Presentar material y argumentos científicos de manera oral y escrita a una audiencia especializada
D1	Comunicarse de forma oral y escrita en al menos una de las lenguas oficiales de la Universidad
D3	Aprender de forma autónoma
D4	Buscar y gestionar información procedente de distintas fuentes
D5	Utilizar las tecnologías de la información y de las comunicaciones y manejar herramientas informáticas básicas
D6	Manejar las matemáticas, incluyendo aspectos tales como análisis de errores, estimaciones de órdenes de magnitud, uso correcto de unidades y modos de presentación de datos
D7	Aplicar los conocimientos teóricos a la práctica
D8	Trabajar en equipo
D9	Trabajar de forma autónoma
D12	Planificar y gestionar adecuadamente el tiempo
D13	Tomar decisiones
D14	Analizar y sintetizar información y obtener conclusiones
D15	Evaluar de modo crítico y constructivo su entorno y a sí mismo

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

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

Contenidos

Tema	
Campo electromagnético: ecuaciones de Maxwell.	Corriente de desplazamiento Ecuaciones de Maxwell. Energía Ecuación de ondas
Cuantización de la radiación. Dualidad onda-corpúsculo	Catástrofe ultravioleta Efecto fotoeléctrico Rayos X. Condición de Bragg. Radiación de frenado efecto Compton Dualidad onda-corpúsculo
Principios de Mecánica Cuántica	Limitaciones de la Física Clásica y origen de la Mecánica Cuántica Hipótesis de De Broglie Relación de indeterminación Postulados de la Mecánica Cuántica Teorema del virial
Estudio mecano-cuántico de sistemas modelo	Introducción. Partícula en una caja de potencial. Oscilador armónico. Momento angular y rotor rígido.

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

Planificación

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

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

Metodologías

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

Atención personalizada

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

Evaluación

	Descripción	Calificación	Resultados de Formación y Aprendizaje
Resolución de problemas y/o ejercicios	Básicamente se centrará en la resolución de ejercicios en el aula. No obstante, se podrá también pedir al alumno que entregue ejercicios propuestos y que el resuelva de manera autónoma. En este caso el profesor podrá pedir al alumno que le explique individualmente como ha resuelto el ejercicio.	15	

Pruebas de respuesta corta	Se Celebrarán 2 pruebas de respuesta corta. Se referirán, respectivamente, a la materia de los temas 1 a 3 y 4 a 8. La superación de cada una de ellas permitirá que los alumnos puedan no volver a examinarse de esa materia en el examen final del cuatrimestre, pero no así en el examen de segunda oportunidad (junio-julio).	42.5
Pruebas de respuesta larga, de desarrollo	Al terminar el curso se celebrará una prueba completa en la que los alumnos que lo deseen podrán repetir aquellos aspectos que no superaron en las pruebas cortas realizadas.	42.5

Otros comentarios sobre la Evaluación

Durante el curso se realizarán dos pruebas cortas referidas a los temas 1-3, la primera, y a los temas 4-8, la segunda. Ambas contendrán problemas y cuestiones y su superación liberará a los alumnos de esa parte de la asignatura. De manera voluntaria, los alumnos podrán participar en la resolución de ejercicios en los seminarios o entregar ejercicios propuestos.

También podrán presentarse a un examen final, que incluirá toda la materia, que les permitirá aumentar la puntuación alcanzada en los parciales.

Todo alumno deberá alcanzar al menos una calificación de 3.5 sobre 10 en el global de sus pruebas escritas para poder acumular la puntuación correspondiente a resolución de ejercicios.

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

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

Fuentes de información

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

En algunos casos existen otras ediciones más modernas (inglés) o antiguas (castellano)

Recomendaciones

Asignaturas que continúan el temario

Química física II/V11G200V01403

Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente

Física: Física I/V11G200V01102

Física: Física II/V11G200V01201

Matemáticas: Matemáticas I/V11G200V01104

Matemáticas: Matemáticas II/V11G200V01203

DATOS IDENTIFICATIVOS				
Química analítica I				
Asignatura	Química analítica I			
Código	V11G200V01302			
Titulación	Grado en Química			
Descriptores	Creditos ECTS	Seleccione	Curso	Cuatrimestre
	9	OB	2	1c
Lengua	Castellano			
Impartición	Gallego			
Departamento	Química analítica y alimentaria			
Coordinador/a	Pérez Cid, Benita			
Profesorado	Bendicho Hernández, José Carlos González Romero, Elisa Leao Martins, Jose Manuel Pérez Cid, Benita			
Correo-e	benita@uvigo.es			
Web				
Descripción general	El principal objetivo de la materia Química Analítica (I) es que el alumno alcance una visión general del análisis químico cualitativo y cuantitativo, tanto en el aspecto teórico como aplicado, lo que le servirá de base para el aprendizaje de otras materias que se impartirán en cursos posteriores, particularmente en lo referente al diseño y aplicación de métodos analíticos más complejos. Las clases de teoría se complementan con experimentos prácticos y seminarios.			

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

D15 Evaluar de modo crítico y constructivo su entorno y a sí mismo

D16 Desarrollar un compromiso ético

Resultados de aprendizaje

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

Contenidos

Tema

Tema 1: Química Analítica y proceso analítico.	La Química Analítica como ciencia metrológica. Clasificación de los métodos analíticos. El proceso analítico: etapas. Tipos de problemas analíticos y escalas de trabajo. Jerarquización conceptual y técnica.
Tema 2: Evaluación de los resultados analíticos.	Propiedades analíticas. Errores en Química Analítica: clasificación. Estadística básica aplicada a la expresión de resultados. Comparación y rechazo de resultados. Concepto de trazabilidad.
Tema 3: Introducción al Análisis Químico cualitativo y cuantitativo.	Operaciones previas al análisis. Muestreo y tratamiento de la muestra. Descomposición y disolución. Introducción a las separaciones analíticas. Análisis cualitativo: características de las respuestas binarias. Análisis cuantitativo clásico e instrumental. Metodologías de cuantificación. Métodos calculables y relativos.
Tema 4: Análisis cuantitativo volumétrico y gravimétrico.	Reacciones volumétricas. Disoluciones patrón. Valoraciones directas, por retroceso e indirectas. Formación, propiedades y pureza de los precipitados. Cálculos del análisis gravimétrico y volumétrico.
Tema 5: Volumetrías ácido-base.	Comportamiento de especies monopróticas, polipróticas y anfóteras. Curvas de valoración. Detección del punto final: indicadores ácido-base. Reactivos valorantes. Aplicaciones analíticas.
Tema 6: Volumetrías de formación de complejos.	Estabilidad de los complejos. Reacciones de enmascaramiento. Curvas de valoración. Detección del punto final: indicadores metalocrómicos. Aplicaciones analíticas.
Tema 7: Volumetrías de precipitación.	Factores que afectan a la solubilidad de los precipitados. Curvas de valoración. Detección del punto final: métodos de Mohr, Volhard y Fajans. Aplicaciones analíticas.
Tema 8: Volumetrías de oxidación-reducción.	Factores que modifican el potencial redox. Curvas de valoración. Detección del punto final: indicadores redox e indicadores específicos. Aplicaciones analíticas.
Análisis cualitativo (Laboratorio)	Separación e identificación de especies químicas. (3 sesiones)
	Resolución de un problema analítico mediante una sistemática de separación. (2 sesiones)
Análisis gravimétrico (Laboratorio)	Determinación gravimétrica de níquel con dimetilgloxima. (1 sesión)
Volumetrías ácido-base (Laboratorio)	Determinación de la acidez de una muestra de vinagre. (1 sesión)
	Determinación de ácido acetilsalicílico en analgésicos. (1 sesión)
Volumetrías de formación de complejos (Laboratorio)	Estandarización de una disolución de Na ₂ -AEDT con Zn (II). (1 sesión)
	Determinación de la dureza de una muestra de agua. (1 sesión)
Volumetrías de precipitación (Laboratorio)	Determinación de cloruros en una muestra de agua de mar por el método de Mohr. (1 sesión)
Volumetrías de oxidación-reducción (Laboratorio)	Determinación de la riqueza en oxígeno de una muestra de H ₂ O ₂ comercial. (1 sesión)
	Determinación de cloro activo en una muestra de lejía. (1 sesión)

Planificación

	Horas en clase	Horas fuera de clase	Horas totales
Sesión magistral	26	33	59
Resolución de problemas y/o ejercicios	26	36	62
Prácticas de laboratorio	45.5	12.5	58
Informes/memorias de prácticas	0	6	6
Pruebas de respuesta corta	4	11	15
Pruebas de respuesta larga, de desarrollo	3.5	12	15.5
Pruebas prácticas, de ejecución de tareas reales y/o simuladas.	3.5	6	9.5

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

Metodologías

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

Resolución de problemas y/o ejercicios	Cada semana se dedicarán dos horas a la resolución de problemas y/o ejercicios propuestos (seminario) que servirán para reforzar los conocimientos adquiridos en las clases teóricas. En unas sesiones el profesor explicará a los alumnos los problemas-tipo que le permitan llevar a cabo el planteamiento y resolución de los mismos. En cambio, en otras sesiones, serán los propios alumnos los que resolverán y explicarán en la pizarra los ejercicios propuestos en los boletines (material on-line). Se podrá solicitar a los alumnos que entreguen, de forma individual, algunos de estos ejercicios resueltos, que serán corregidos por el profesor.
Prácticas de laboratorio	Se realizarán experimentos de laboratorio, de forma individual, en sesiones de 3.5 h cada una. El alumno dispondrá de los guiones de prácticas en la plataforma Tem@, a fin de que pueda tener conocimiento previo de los experimentos a realizar. Durante el desarrollo de las prácticas el alumno elaborará un cuaderno de laboratorio en el que anotará todo lo relativo al experimento realizado (reacciones, procedimientos, observaciones, resultados, etc.). Podrán quedar exentos de realizar las prácticas de laboratorio aquellos alumnos que las hayan aprobado en el curso académico 2015-16, si así lo desean. En este caso, se mantendrá, en la parte de laboratorio, la calificación alcanzada en su día.

Atención personalizada

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

Evaluación

	Descripción	Calificación	Resultados de Formación y Aprendizaje
Resolución de problemas y/o ejercicios	Se valorará la resolución, por parte del alumno, de algunos de los problemas y/o ejercicios propuestos en los boletines, que deben ser entregados al profesor.	8	C1 D4 C2 D5 C4 D6 C18 D7 C19 D9 C22 D14
Prácticas de laboratorio	El profesor realizará un seguimiento del trabajo experimental realizado por el alumno en las sesiones de laboratorio (competencias y destrezas adquiridas). Es importante indicar que es OBLIGATORIA la asistencia a todas las sesiones de laboratorio. Si el número de ausencias es igual o superior al 25 % de las sesiones de laboratorio, supondrá suspender la asignatura.	15	A5 C1 D6 C2 D7 C4 D8 C17 D9 C18 D12 C19 D13 C20 D14 C21 D15 C22 D16 C25 C26 C27 C28 C29
Informes/memorias de prácticas	Durante las sesiones de laboratorio, el alumno elaborará un cuaderno en el que refleje el trabajo experimental llevado a cabo (reacciones, procedimientos, observaciones, resultados, etc.). Dicho cuaderno será evaluado por el profesor.	5	C20 D1 D3 D6 D9 D12 D14 D15 D16

Pruebas de respuesta corta	Se realizará una primera prueba corta sobre formulación de compuestos químicos y cálculo de concentraciones que supondrá un 7 % de la calificación final.	27	A5	C1 C2 C4 C19 C20 C22	D1 D3 D4 D5 D6 D7 D9 D12 D13 D14 D16
	Se realizará una segunda prueba corta correspondiente a los cuatro primeros temas del programa. Dicha prueba eliminará materia, en caso de ser aprobada y supondrá un 20 % de la calificación final. Los alumnos que no la superen tendrán que examinarse de esta parte de la materia en la prueba final.				
Pruebas de respuesta larga, de desarrollo	Se realizará una última prueba escrita correspondiente a los cuatro últimos temas del programa. Los alumnos que no hayan superado la prueba correspondiente a los cuatro primeros temas tendrán que examinarse de toda la materia. Dicha prueba se realizará el día del examen final.	30	A5	C1 C2 C4 C18 C19 C20 C22	D1 D3 D4 D5 D6 D7 D9 D12 D13 D14 D16
Pruebas prácticas, de ejecución de tareas reales y/o simuladas.	Al final de las sesiones de laboratorio, se realizará una prueba de laboratorio que permitirá evaluar las competencias y destrezas adquiridas por el alumno. Es necesario superar esta prueba para aprobar la parte práctica de la asignatura.	15	A5	C28 C29	D1 D3 D6 D7 D9 D12 D13 D15 D16

Otros comentarios sobre la Evaluación

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

Segunda Convocatoria: En la convocatoria extraordinaria el alumno podrá repetir aquellas pruebas (teoría y/o laboratorio) que no haya superado en la convocatoria ordinaria. Se conservarán las puntuaciones alcanzadas por el alumno, durante el curso, en las demás actividades que figuran en el apartado de evaluación.

Fuentes de información

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

Recomendaciones

Asignaturas que continúan el temario

Química analítica II/V11G200V01503

Química analítica III/V11G200V01601

Asignaturas que se recomienda cursar simultáneamente

Física III/V11G200V01301

Química física I/V11G200V01303

Química orgánica I/V11G200V01304

Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente

Química, física y biología: Laboratorio integrado I/V11G200V01103

Química, física y geología: Laboratorio integrado II/V11G200V01202

Química: Química I/V11G200V01105

Química: Química II/V11G200V01204

DATOS IDENTIFICATIVOS				
Química física I				
Asignatura	Química física I			
Código	V11G200V01303			
Titulación	Grado en Química			
Descriptores	Creditos ECTS	Seleccione	Curso	Cuatrimestre
	6	OB	2	1c
Lengua	Castellano			
Impartición	Gallego			
Departamento	Química Física			
Coordinador/a	Hervés Beloso, Juan Pablo			
Profesorado	Hervés Beloso, Juan Pablo Mandado Alonso, Marcos			
Correo-e	jherves@uvigo.es			
Web	http://webs.uvigo.es/qf1_web/			
Descripción general	La materia Química Física I es uno de los primeros contactos de un estudiante de Química con la Química Física. Esta disciplina estudia las propiedades y el comportamiento de los sistemas químicos empleando los métodos de la Física. En esta materia se aborda el tratamiento macroscópico riguroso de sistemas químicos en equilibrio, sistemas ya introducidos en la materia Química I. Aprovechando el conocimiento básico de los principios de la Termodinámica, se aplicarán a sistemas de interés químico para disponer de una descripción cuantitativa de los mismos. Para este tratamiento cuantitativo es fundamental estar familiarizado con el cálculo diferencial de más de una variable y el cálculo integral de una variable, aspectos abordados en la materia Matemáticas II. Los conocimientos sobre la descripción macroscópica de los sistemas químicos que se alcanzarán en esta materia se complementan con los contenidos de la Química Física III del tercer curso. La aplicación experimental de estos conocimientos se efectuará en la materia del segundo cuatrimestre Química Física II.			

Competencias

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

Resultados de aprendizaje

Resultados previstos en la materia	Resultados de Formación y Aprendizaje	
Emplear el concepto de función de estado para calcular las variaciones de las distintas funciones de estado termodinámicas de una sustancia pura.	C6	D1
	C19	D3
	C20	D4
	C23	D5
		D6
		D7
		D8
		D9
		D12
		D13
		D14
		D15

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

Calcular las características termodinámicas de un cambio de fase, y saber el intervalo de aplicabilidad de las ecuaciones empleadas	C6 C19 C20 C23	D1 D3 D4 D5 D6 D7 D8 D9 D12 D13 D14 D15
Calcular las propiedades termodinámicas de una disolución ideal a partir de su composición	C6 C19 C20 C23	D1 D3 D4 D5 D6 D7 D8 D9 D12 D13 D14 D15
Calcular las propiedades coligativas de una disolución a partir de la concentración del soluto y las propiedades del disolvente. Establecer cuándo estos resultados se pueden aplicar a un caso real	C6 C19 C20 C23	D1 D3 D4 D5 D6 D7 D8 D9 D12 D13 D14 D15
Calcular las actividades y coeficientes de actividad de disoluciones no electrolíticas y emplear el modelo adecuado para el cálculo del coeficiente de actividad iónico medio. Obtener este coeficiente a partir de medidas experimentales	C6 C18 C19 C20 C23	D1 D3 D4 D5 D6 D7 D8 D9 D12 D13 D14 D15
Emplear medidas experimentales procedentes de las células galvánicas para determinar funciones de estado de reacción	C6 C18 C19 C20 C23	D1 D3 D4 D5 D6 D7 D8 D9 D12 D13 D14 D15

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

Contenidos

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

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

Planificación

	Horas en clase	Horas fuera de clase	Horas totales
Sesión magistral	26	31	57
Seminarios	26	38	64
Resolución de problemas y/o ejercicios	0	14	14
Pruebas de autoevaluación	0	10	10
Pruebas de respuesta corta	2	0	2
Pruebas de respuesta larga, de desarrollo	3	0	3

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

Metodologías

	Descripción
Sesión magistral	Consistirán en la exposición breve por parte del profesor de los aspectos fundamentales de cada tema, tomando como base el material disponible en la plataforma TEMA. También se plantearán problemas numéricos que ayuden a comprender y asentar conceptos.
Seminarios	Las clases de seminario se dedicarán a la resolución de problemas y se profundizará sobre los aspectos que presenten mayores dificultades a los alumnos. Estas clases serán principalmente labor del alumno, bajo la supervisión del profesor.

Atención personalizada

Pruebas	Descripción
Pruebas de autoevaluación	Los alumnos resolverán de forma autónoma cuestionarios tipo test a través de la plataforma Tema y serán tutorizados individualmente por el profesor.
Resolución de problemas y/o ejercicios	Los alumnos resolverán de forma autónoma problemas propuestos y serán tutorizados individualmente por el profesor.

Evaluación

	Descripción	Calificación	Resultados de Formación y Aprendizaje	
Resolución de problemas y/o ejercicios	Problemas propuestos para cada tema de la materia.	Hasta un 7,5	C6 C18 C19 C20 C23	D1 D3 D4 D6 D7 D8 D9 D12 D13 D14 D15

Pruebas de autoevaluación	Pruebas tipo test en la plataforma TEMA.	Hasta un 7,5	C6 C18 C19 C20	D3 D4 D5 D7 D9 D12 D13 D14 D15
Pruebas de respuesta corta	Pruebas escrituras cortas sobre ciertas partes de la materia.	Hasta un 20	C6 C18 C19 C20	D1 D3 D4 D6 D7 D9 D12 D13 D14 D15
Pruebas de respuesta larga, de desarrollo	*Examen escrito sobre todo* los contenidos de la materia.	Mínimo un 65	C6 C18 C19 C20	D1 D3 D4 D6 D7 D9 D12 D13 D14

Otros comentarios sobre la Evaluación

- El trabajo voluntario del alumno (tests autoevaluables + problemas propuestos) podrán constituir hasta el 15% de la calificación final siempre que el alumno realice, por lo menos, la mitad de las actividades que se propongan a lo largo del curso.

- Se realizará una prueba escrita corta (de dos horas de duración) de la primera mitad de la materia. Esta prueba puede eliminar materia. La realización de esta prueba es la condición mínima para que la materia sea calificada en acta. Esta prueba corta podrá suponer hasta un 20% de la calificación final.

-Se realizará una prueba escrita global al final de cuatrimestre (alrededor de tres horas de duración) sobre la totalidad de los contenidos de la materia. Esta prueba global supondrá por lo menos un 65% de la calificación final. En caso de que el alumno supere la prueba corta (≥ 5) podrá optar en la prueba escrita global entre examinarse solamente de la segunda mitad de la materia o de la totalidad de la asignatura. En el primer caso, la nota de la prueba global hará media con la prueba corta.

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

- En las siguientes convocatorias de la materia se respetarán los porcentajes anteriores y se mantendrán las calificaciones obtenidas en el trabajo voluntario y en la prueba corta realizada durante el curso, excepto en el caso de cambio de profesor, quien será el que establezca nuevas normas.

Fuentes de información

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

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

Engel, **Química Física**, Pearson,

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

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

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

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

Metz, **Fisicoquímica. Problemas y Soluciones**, McGraw-Hill,

Recomendaciones

Asignaturas que continúan el temario

Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente

Matemáticas: Matemáticas II/V11G200V01203

Química: Química I/V11G200V01105

Química: Química II/V11G200V01204

DATOS IDENTIFICATIVOS				
Química orgánica I				
Asignatura	Química orgánica I			
Código	V11G200V01304			
Titulación	Grado en Química			
Descriptores	Creditos ECTS	Selección	Curso	Cuatrimestre
	9	OB	2	1c
Lengua	Castellano			
Impartición	Gallego			
Departamento	Química orgánica			
Coordinador/a	Iglesias Antelo, María Beatriz			
Profesorado	Cid Fernández, María Magdalena Iglesias Antelo, María Beatriz Muñoz López, Luis Terán Moldes, María del Carmen			
Correo-e	bantelo@uvigo.es			
Web				
Descripción general	En esta materia se pretende dar al alumnado una formación sobre los principios fundamentales en los que se basa la Química Orgánica, haciendo referencia a la estructura y reactividad de los compuestos orgánicos. Después de dos temas generales, se llevará a cabo el estudio detallado de la reactividad de los grupos funcionales con enlace múltiple carbono-carbono, incluyendo los compuestos aromáticos, y carbono-oxígeno.			

Competencias	
Código	
C2	Demostrar conocimiento y comprensión de hechos esenciales, conceptos, principios y teorías en: tipos de reacción química y sus principales características asociadas
C10	Demostrar conocimiento y comprensión de hechos esenciales, conceptos, principios y teorías en: propiedades de los compuestos alifáticos, aromáticos, heterocíclicos y organometálicos
C11	Demostrar conocimiento y comprensión de hechos esenciales, conceptos, principios y teorías en: naturaleza y comportamiento de los grupos funcionales en moléculas orgánicas
C12	Demostrar conocimiento y comprensión de hechos esenciales, conceptos, principios y teorías en: rasgos estructurales de los elementos químicos y sus compuestos, incluyendo la estereoquímica
C13	Demostrar conocimiento y comprensión de hechos esenciales, conceptos, principios y teorías en: principales rutas de síntesis en Química Orgánica, incluyendo las interconversiones de grupos funcionales y la formación de los enlaces carbono-carbono y carbono-heteroátomo
C19	Aplicar dicho conocimiento y comprensión a la resolución de problemas cuantitativos y cualitativos de naturaleza básica
C20	Evaluar, interpretar y sintetizar datos e información química
C21	Reconocer e implementar buenas prácticas científicas de medida y experimentación
C23	Presentar material y argumentos científicos de manera oral y escrita a una audiencia especializada
C25	Manejar con seguridad sustancias químicas, considerando sus propiedades físicas y químicas, incluyendo la valoración de cualquier riesgo específico asociado con su uso
C26	Realizar procedimientos habituales de laboratorio y utilizar la instrumentación en trabajo sintético y analítico
C27	Monitorizar, mediante observación y medida de propiedades físicas y químicas, sucesos o cambios y documentarlos y registrarlos de manera sistemática y fiable
C28	Interpretar datos derivados de las observaciones y mediciones del laboratorio en términos de su significado y relacionarlos con la teoría adecuada
D1	Comunicarse de forma oral y escrita en al menos una de las lenguas oficiales de la Universidad
D3	Aprender de forma autónoma
D4	Buscar y gestionar información procedente de distintas fuentes
D5	Utilizar las tecnologías de la información y de las comunicaciones y manejar herramientas informáticas básicas
D7	Aplicar los conocimientos teóricos a la práctica
D8	Trabajar en equipo
D9	Trabajar de forma autónoma
D12	Planificar y gestionar adecuadamente el tiempo
D13	Tomar decisiones
D14	Analizar y sintetizar información y obtener conclusiones
D15	Evaluar de modo crítico y constructivo su entorno y a sí mismo

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

Distinguir las reacciones más habituales en Química Orgánica. Relacionar el perfil energético con una reacción determinada. Diferenciar los tipos de reactivos. Diferenciar los tipos de intermedios de reacción.	C2 C19	D1 D3 D4 D7 D9 D12 D14
Establecer la influencia de la estructura y las características químicas de los grupos funcionales presentes en una molécula en su reactividad.	C2 C11	D1 D3 D4 D7 D9 D12 D14
Explicar la reactividad de los compuestos carbonílicos mediante un mecanismo de adición nucleófila y de los ácidos carboxílicos y sus derivados mediante un mecanismo de adición-eliminación.	C2 C10 C11 C13	D1 D3 D4 D7 D9 D12 D14
Explicar la reactividad de compuestos orgánicos con enlaces múltiples carbono-carbono mediante un mecanismo de adición electrófila.	C2 C10 C11 C13	D1 D3 D4 D7 D9 D12 D14
Explicar la reactividad de los compuestos aromáticos a través de un mecanismo de sustitución electrófila.	C2 C10 C11 C13	D1 D3 D4 D7 D9 D12 D14
Describir detalladamente para cada transformación el mecanismo de reacción adecuado, indicando etapas de reacción, estados de transición, intermedios etc.	C2 C11	D1 D3 D4 D7 D9 D12 D14
Predecir el resultado de la reacción de un sustrato concreto con un reactivo dado en unas condiciones determinadas, en lo concerniente a la regioselectividad y estereoselectividad de la reacción.	C11 C12 C13 C19	D1 D3 D4 D7 D9 D12 D14
Aplicar las normas de seguridad y higiene en el trabajo de laboratorio y llevar a cabo el tratamiento y la eliminación correcta de los residuos generados.	C25	D1 D3 D4 D7 D9 D12 D13 D14 D15
Realizar correctamente los procedimientos experimentales habituales en preparaciones orgánicas sencillas.	C21 C26	D1 D3 D4 D7 D9 D12 D13 D14

Llevar a cabo la elaboración del producto de una reacción, así como su aislamiento y purificación mediante técnicas habituales (extracción, destilación, recristalización y cromatografía).	C21 C26 C27	D1 D3 D4 D7 D9 D12 D13 D14
Redactar y describir de forma adecuada los experimentos realizados en el cuaderno de laboratorio, de modo que sean reproducibles.	C23 C27 C28	D1 D3 D4 D7 D9 D12 D13 D14 D15
Buscar y seleccionar información sobre los temas estudiados.	C20	D4 D5 D8 D14 D15

Contenidos

Tema	
Tema 1. Estereoisomería configuracional	Grupos funcionales. Representación tridimensional de estructuras orgánicas. Configuración absoluta de centros estereogénicos, compuestos cíclicos y alquenos.
Tema 2. Reactividad de los compuestos orgánicos	Reactividad ácido-base de compuestos orgánicos. Mecanismos de reacción: reacciones por pasos. Perfil energético de una reacción. Rotura heterolítica de enlaces. Reacciones iónicas. Intermedios de reacción: carbaniones. Reactividad redox de compuestos orgánicos. Estados formales de oxidación.
Tema 3. Reacciones de adición a enlaces múltiples carbono-carbono	Estructura y reactividad general de los grupos funcionales con enlaces múltiples carbono-carbono: alquenos y alquinos. Hidrogenación: calores de hidrogenación y estabilidad de alquenos y dienos; rotura homolítica de enlaces; reacciones concertadas. Reacciones de adición electrófila a alquenos. Adición de HX; intermedios de reacción: carbocationes; regioselectividad; electrófilos y nucleófilos. Reacciones de hidratación; orientación y estereoquímica. Adición de halógenos (X ₂). Reacciones de dihidroxilación. Reacciones de adición a alquinos.
Tema 4. Reacciones de sustitución aromática	Estructura y reactividad general de los compuestos aromáticos. Mecanismo general de la sustitución electrófila aromática. Reacciones con electrófilos no carbonados. Reacciones con electrófilos carbonados. Reacciones de sustitución electrófila aromática en sistemas sustituidos: orientación y reactividad. Modulación de la reactividad de anillos aromáticos. Reacciones de sustitución nucleófila aromática.
Tema 5. Reacciones de adición nucleófila a grupos carbonilo	Estructura y reactividad general del grupo carbonilo (aldehídos y cetonas). Mecanismo general de la adición nucleófila. Adiciones nucleófilas no reversibles: adición de compuestos organometálicos (alquinos, organolíticos y magnesianos); adición de carbaniones estabilizados; adición de hidruro. Adiciones nucleófilas reversibles: adición de compuestos oxigenados y de azufre (agua, alcoholes y tioles); adición de compuestos nitrogenados (aminas y otros compuestos nitrogenados); adición de cianuro de hidrógeno.
Tema 6. Reacciones de sustitución nucleófila sobre grupos carbonilo	Estructura y reactividad general de los ácidos carboxílicos y derivados de ácido. Reactividad relativa de los derivados de ácido: basicidad y electrofilia. Reacciones no reversibles de adición-eliminación: grupo saliente. Reacciones reversibles de adición-eliminación: catálisis básica y catálisis ácida. Reacciones con agua y alcoholes; reacciones con amoníaco y aminas. Estructura y reactividad de nitrilos. Reacciones de nitrilos.

Práctica 1	Separación de mezclas de compuestos orgánicos mediante dos técnicas: extracción ácido-base (líquido-líquido) y cromatografía en columna. Cuatro sesiones.
Práctica 2	Adición electrófila a un doble enlace. Una sesión.
Práctica 3	Sustitución electrófila aromática. Una sesión.
Práctica 4	Reducción de una cetona. Una sesión.
Práctica 5	Preparación de una hidrazona. Una sesión.
Práctica 6	Hidrólisis de un éster. Una sesión.
Práctica 7	Proyecto de síntesis. Cuatro sesiones.

Planificación

	Horas en clase	Horas fuera de clase	Horas totales
Sesión magistral	26	26	52
Resolución de problemas y/o ejercicios	26	49	75
Prácticas de laboratorio	45.5	9.5	55
Trabajos y proyectos	0	9	9
Pruebas de respuesta corta	10	24	34

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

Metodologías

	Descripción
Sesión magistral	Exposición por parte del profesorado de los aspectos generales del programa de forma estructurada, haciendo especial énfasis en los fundamentos y aspectos más importantes o de difícil comprensión para el alumno. El profesorado facilitará, a través de la plataforma Tema, el material necesario para la realización del trabajo personal del estudiante. Este deberá trabajar previamente el material entregado y consultar la bibliografía recomendada para completar la información, con la finalidad de seguir las explicaciones de los contenidos del programa con mayor aprovechamiento.
Resolución de problemas y/o ejercicios	Cada semana se dedicarán dos horas a discutir los aspectos más destacados de los temas tratados, a resolver cuestiones surgidas en el desarrollo de los mismos y a la resolución de los ejercicios propuestos.
Prácticas de laboratorio	Se realizarán experimentos de laboratorio, de manera individual, en sesiones de 3.5 h. El alumnado encontrará, con antelación, en la plataforma Tema, el material necesario para la preparación previa de los experimentos a realizar. Al inicio de cada sesión el profesor hará una exposición de los contenidos a desarrollar. Durante la realización de las prácticas el alumno elaborará un cuaderno de laboratorio en el que deberá anotar todas las observaciones relativas al experimento realizado. Al final de la sesión deberá contestar a cuestiones relacionadas con el trabajo realizado.

Atención personalizada

Metodologías	Descripción
Resolución de problemas y/o ejercicios	El profesorado atenderá las consultas del alumnado relacionadas con el estudio de los temas vinculados a la materia y con las actividades desarrolladas en la misma. Los horarios de atención a estudiantes del profesorado de la materia estarán disponibles en la página web de la Facultad de Química (http://quimica.uvigo.es/profesorado.php).
Pruebas	Descripción
Trabajos y proyectos	El profesorado tutorizará a los estudiantes en la elaboración y realización de un pequeño proyecto de laboratorio.

Evaluación

	Descripción	Calificación	Resultados de Formación y Aprendizaje	
Resolución de problemas y/o ejercicios	Se valorará la participación en clase y la resolución por parte del estudiante de todos los problemas y/o ejercicios propuestos en tiempo/condiciones establecidas por el profesorado.	25	C2 C10 C11 C12 C13 C19 C20	D1 D4 D7 D8 D9 D14

Prácticas de laboratorio	La asistencia a las clases prácticas es obligatoria.	0	C21	D12
			C25	D13
	El seguimiento del trabajo de laboratorio será evaluado cómo APTO/NO APTO.		C26	D14
	En este apartado se incluirán los siguientes aspectos: fichas previas, desarrollo del trabajo experimental, cuaderno de laboratorio, cuestiones. Para superar la materia es imprescindible ser evaluado como APTO.		C27	D15
			C28	
Trabajos y proyectos	El estudiante elaborará un informe previo a la realización de un pequeño proyecto en el laboratorio en la última semana de prácticas.	15	C20	D1
			C23	D4
			C25	D5
				D9
Pruebas de respuesta corta	Primera prueba: 15%. Abarcará el contenido correspondiente a los tres primeros temas.	60		D14
			C2	D3
			C10	D7
			C11	D12
	Segunda prueba: 15%. Abarcará el contenido correspondiente a los tres últimos temas.		C12	D14
			C13	
			C19	
	Prueba escrita de la parte experimental: 15%. A realizar por el alumnado que haya alcanzado el APTO en el seguimiento del trabajo de laboratorio. En esta prueba se evaluará la adquisición, por parte del alumnado, de competencias y destrezas relacionadas con los aspectos experimentales de la materia.			
	Prueba global: 15%. En esta prueba se evaluará la adquisición, por parte del alumnado, de competencias y destrezas relacionadas con los aspectos teóricos de la materia.			

Otros comentarios sobre la Evaluación

Para superar la asignatura en enero será necesario:

- Conseguir mención de **APTO** en la evaluación del trabajo de laboratorio.
- Conseguir una calificación **mínima de 3 puntos sobre 10** en cada una de las dos pruebas cortas teóricas (primera prueba y segunda prueba) y en la prueba escrita de la parte experimental.
- Conseguir una calificación **mínima de 4 puntos sobre 10** en la prueba global.

Si no se cumple alguna de las condiciones anteriores, la calificación que figurará en el acta será la calificación ponderada del apartado de pruebas.

- Conseguir una puntuación mínima de 5.0 en la suma ponderada de todos los apartados (resolución de problemas y/o ejercicios, pruebas de respuesta corta, trabajos y proyectos).

La participación del estudiante en alguno de los actos de evaluación de la materia implicará la condición de [presentado/a] y, por lo tanto, la asignación de una calificación. Se consideran actos de evaluación la asistencia a clases prácticas de laboratorio (25% o mas) o la entrega de trabajos/ejercicios encargados por el profesorado (25% o mas) o la realización de alguna prueba.

Alumnado de 2ª y posteriores matrículas. A aquellos estudiantes que aprobaron las prácticas de laboratorio en los cursos 2014-15 o 2015-16 se les otorgará la mención de APTO en el seguimiento del trabajo de laboratorio en el curso académico 2016-17, no siendo necesaria la realización del trabajo experimental nuevamente. No obstante, deberán realizar el informe del proyecto (15%) y la prueba escrita de la parte experimental (15%) para conseguir la calificación correspondiente a la parte experimental de la asignatura en el curso académico 2016-17.

EVALUACIÓN EN JULIO

Podrá recuperarse el 45% del apartado Pruebas de respuesta corta, del modo siguiente:

- **Pruebas (30%).** Se realizará una prueba global en la que se evaluarán las competencias adquiridas en los aspectos teóricos de la materia. Deberá conseguirse una calificación **mínima de 4 puntos sobre 10** para que se tenga en cuenta el resultado de esta prueba en la calificación global de la materia. Este resultado sustituirá a las dos peores calificaciones de las tres pruebas teóricas realizadas durante el cuatrimestre (primera prueba, segunda prueba, prueba global), conservándose la calificación mas alta de las tres, siempre que supere el mínimo exigido.
- **Prueba escrita de la parte experimental (15%).** Deberá conseguirse una calificación **mínima de 3 puntos sobre 10**. La nueva calificación sustituirá a la conseguida en la prueba escrita de la parte experimental de fin de

cuatrimestre.

La calificación final será la suma ponderada de todos los apartados (resolución de problemas y/o ejercicios, pruebas de respuesta corta, trabajos y proyectos), siempre que se superen los mínimos exigidos. De no ser el caso, la calificación que figurará en el acta será la calificación ponderada del apartado de pruebas. En caso de que esta calificación sea inferior a la obtenida en la evaluación de fin de cuatrimestre, la calificación que figurará en el acta será esta última.

Fuentes de información

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

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

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

Bibliografía complementaria

- CAREY, F. *Química Orgánica*, 6ª edición en español, McGraw-Hill Interamericana, 2006.
- CLAYDEN, J.; GREEVES, N.; WARREN, S. *Organic Chemistry*, 2ª edición, Oxford University Press, 2012.
- YURKANIS BRUCE, P. *Fundamentos de Química Orgánica*, 3ª edición, Pearson, 2015.
- DOBADO, J. A.; GARCÍA-CALVO, F.; GARCÍA, J. I. *Química Orgánica: Ejercicios comentados*, Garceta, 2012.
- PALLEROS, D. R. *Experimental Organic Chemistry*, John Wiley and Sons, 2000.
- QUIÑOÁ, E.; RIGUERA, R. *Cuestiones y ejercicios de Química Orgánica*, 2ª edición, McGraw-Hill Interamericana, 2004.
- QUIÑOÁ, E.; RIGUERA, R. *Nomenclatura y representación de los compuestos orgánicos*, 2ª edición, McGraw-Hill Interamericana, 2005.

Recomendaciones

Asignaturas que continúan el temario

Química orgánica II/V11G200V01504

Química orgánica III/V11G200V01704

Asignaturas que se recomienda cursar simultáneamente

Física III/V11G200V01301

Química analítica I/V11G200V01302

Química física I/V11G200V01303

Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente

Biología: Biología/V11G200V01101

Química, física y biología: Laboratorio integrado I/V11G200V01103

Química, física y geología: Laboratorio integrado II/V11G200V01202

Química: Química I/V11G200V01105

Química: Química II/V11G200V01204

DATOS IDENTIFICATIVOS				
Herramientas informáticas y de comunicación en química				
Asignatura	Herramientas informáticas y de comunicación en química			
Código	V11G200V01401			
Titulación	Grado en Química			
Descriptores	Creditos ECTS	Seleccione	Curso	Cuatrimestre
	6	OB	2	2c
Lengua Impartición	Inglés			
Departamento	Química Física Química orgánica			
Coordinador/a	Correa Duarte, Miguel Ángel			
Profesorado	Correa Duarte, Miguel Ángel Pérez Juste, Jorge Silva López, Carlos			
Correo-e	macorrea@uvigo.es			
Web				
Descripción general	Este curso pretende familiarizar a los estudiantes con el uso de fuentes de información química (científica y técnica en general) con énfasis en su uso a través de Internet, así como con el uso de todos los tipos de herramientas de software para cálculos estadísticos y modelización química. Se prestará atención también a la adquisición de importantes habilidades de comunicación (a través de la escritura de documentos científicos y técnicos, académicos, diseño de web, etc).			

Competencias

Código	
C20	Evaluar, interpretar y sintetizar datos e información química
C22	Procesar datos y realizar cálculo computacional relativo a información y datos químicos
C23	Presentar material y argumentos científicos de manera oral y escrita a una audiencia especializada
D1	Comunicarse de forma oral y escrita en al menos una de las lenguas oficiales de la Universidad
D2	Comunicarse a nivel básico en inglés en el ámbito de la Química
D3	Aprender de forma autónoma
D4	Buscar y gestionar información procedente de distintas fuentes
D5	Utilizar las tecnologías de la información y de las comunicaciones y manejar herramientas informáticas básicas
D8	Trabajar en equipo
D9	Trabajar de forma autónoma
D10	Trabajar en un contexto tanto nacional como internacional
D14	Analizar y sintetizar información y obtener conclusiones
D15	Evaluar de modo crítico y constructivo su entorno y a sí mismo
D16	Desarrollar un compromiso ético
D18	Generar nuevas ideas y demostrar iniciativa

Resultados de aprendizaje

Resultados previstos en la materia	Resultados de Formación y Aprendizaje	
(*)Distinguir y manejar las distintas fuentes de información científica y técnica (libros, revistas, resúmenes, bases de datos, páginas web, patentes, etc.).	C23	D1 D2 D4 D5 D9 D14 D16
(*) Diferenciar y clasificar las revistas científicas y las contribuciones a las mismas, en función de su temática, objetivos y alcance.		D2 D4 D5 D8 D9 D14

(*) Buscar y asimilar información rápida y eficazmente.	C23	D1 D2 D3 D5 D8 D9 D10 D15 D18
(*) Ordenar y sintetizar la información para transmitirla eficazmente.	C23	D1 D2 D5 D8 D10 D16
(*) Argumentar los propios puntos de vista mostrando sentido crítico.	C23	D1 D2 D5 D8 D10 D16
(*) Estructurar y elaborar documentos escritos sencillos para la difusión de conocimientos y resultados científicos y técnicos (p.ej. artículos, informes, trabajos).	C23	D1 D2 D5 D8 D10 D16
(*) Manejar de modo adecuado y con espíritu crítico la red ("internet") como fuente de información.	C22	D3 D5 D9 D14 D16
(*) Realizar presentaciones orales sintéticas y claras sobre temas relacionados con la Química, utilizando medios audiovisuales adecuados.	C23	D1 D2 D14 D18
(*) Organizar la propia bibliografía, con o sin ayuda de gestores bibliográficos.	C20	D3 D4 D5 D9 D14 D15
(*) Utilizar programas informáticos para la elaboración de figuras y gráficos.	C22	D4 D5 D9
(*) Comprender los principios básicos y utilidad de los programas de simulación de procesos químicos.	C22	D5 D9 D14
(*) Comprender y explicar textos en inglés relacionados con la Química.	C23	D1 D2 D3 D8
(*) Redactar documentos sencillos y realizar presentaciones orales cortas en inglés, sobre temas relacionados con la Química.	C23	D1 D2 D3 D8 D14
(*) Identificar los programas más importantes de modelización molecular, sabiendo valorar la validez y aplicación de los resultados obtenidos.	C20	D3 D4 D14

Contenidos

Tema

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

(*)Information Sources

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

(*)Using Internet

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

(*)Indexing and abstracting services

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

(*)Bibliographic Managers

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

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

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

Planificación

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

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

Metodologías

	Descripción
Sesión magistral	Explicación de los contenidos correspondientes al tema.
Prácticas en aulas de informática	Prácticas consistentes en: realización de búsquedas bibliográficas, uso de gestores bibliográficos, uso de paquetes estadísticos.
Resolución de problemas y/o ejercicios	Aplicación de los conocimientos adquiridos en las prácticas realizadas.

Atención personalizada

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

Evaluación

	Descripción	Calificación	Resultados de Formación y Aprendizaje	
Prácticas en aulas de informática	(*)Aplicación práctica dos conceptos aprendidos nas sesións maxistrais.	20	C22 C23	D1 D2 D3 D4 D5 D9 D15 D16

Resolución de problemas y/o ejercicios	(*)Posta en práctica dos conocimientos adquiridos mediante a resolución de ejercicios.	40	C22 C23	D1 D2 D3 D4 D5 D8 D10 D14 D15 D18
Pruebas de respuesta larga, de desarrollo	(*)Proba escrita	40		D1 D2 D14 D15

Otros comentarios sobre la Evaluación

La asistencia a clases prácticas (seminarios) es obligatorio. El estudiante será puntuado de (0-10) mientras haya asistido a 3 o más sesiones de seminario, haya entregado al menos dos informes de los ejercicios o las prácticas propuestos por el profesor, o haya hecho un examen escrito.

Si el estudiante falla en la primera prueba tendrá que mejorar algunos de los ejercicios o realizar unos nuevos proporcionados por el profesor. Además tendrá que realizar una examen más minucioso, el cual pesa el 40% del grado final.

Fuentes de información

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

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

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

Recomendaciones

Asignaturas que se recomienda cursar simultáneamente

Métodos numéricos en química/V11G200V01402

Química física II/V11G200V01403

Química inorgánica I/V11G200V01404

Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente

Física: Física I/V11G200V01102

Física: Física II/V11G200V01201

Química: Química I/V11G200V01105

Química: Química II/V11G200V01204

DATOS IDENTIFICATIVOS				
Métodos numéricos en química				
Asignatura	Métodos numéricos en química			
Código	V11G200V01402			
Titulación	Grado en Química			
Descriptores	Creditos ECTS	Seleccione	Curso	Cuatrimestre
	6	OB	2	2c
Lengua Impartición	Gallego			
Departamento	Matemáticas Química analítica y alimentaria Química Física			
Coordinador/a	Besada Morais, Manuel			
Profesorado	Besada Morais, Manuel Hermida Ramón, José Manuel Leao Martins, Jose Manuel			
Correo-e	mbesada@uvigo.es			
Web				
Descripción general	"Traducción automática gallego-->castellano de la guía docente original" Esta materia es la versión práctica matemática de aplicación a datos observados y de solución numérica de numerosos problemas que tienen difícil, o imposible, solución analítica. Permitirá al alumno adquirir habilidades sobre lo manejo de gran cantidad de información numérica y consolidar el manejo de una calculadora científica de gran potencia.			

Competencias

Código	
A3	Que los estudiantes tengan la capacidad de reunir e interpretar datos relevantes (normalmente dentro de su área de estudio) para emitir juicios que incluyan una reflexión sobre temas relevantes de índole social, científica o ética.
A5	Que los estudiantes hayan desarrollado aquellas habilidades de aprendizaje necesarias para emprender estudios posteriores con un alto grado de autonomía.
C19	Aplicar dicho conocimiento y comprensión a la resolución de problemas cuantitativos y cualitativos de naturaleza básica
C22	Procesar datos y realizar cálculo computacional relativo a información y datos químicos
C29	Demostrar habilidades para los cálculos numéricos y la interpretación de los datos experimentais, con especial énfasis en la precisión y la exactitud
D3	Aprender de forma autónoma
D4	Buscar y gestionar información procedente de distintas fuentes
D5	Utilizar las tecnologías de la información y de las comunicaciones y manejar herramientas informáticas básicas
D6	Manejar las matemáticas, incluyendo aspectos tales como análisis de errores, estimaciones de órdenes de magnitud, uso correcto de unidades y modos de presentación de datos
D7	Aplicar los conocimientos teóricos a la práctica
D9	Trabajar de forma autónoma
D12	Planificar y gestionar adecuadamente el tiempo
D13	Tomar decisiones
D14	Analizar y sintetizar información y obtener conclusiones

Resultados de aprendizaje

Resultados previstos en la materia	Resultados de Formación y Aprendizaje		
Utilizar los paquetes numéricos y simbólicos de *MATLAB.		C22 C29	D5
Controlar distintas bases de numeración y enterarse de la existencia de errores cometidos en las aproximaciones	A3	C29	D6 D9 D13 D14

Buscar aproximaciones de raíces de ecuaciones de una variable y sistemas de ecuaciones.	A3 A5	C19 C22 C29	D3 D4 D5 D6 D7 D9 D12 D13 D14
Utilizar *polinomios que se ajustan a varios puntos del plano.	A3 A5	C19 C22 C29	D3 D4 D5 D6 D7 D9 D12 D13 D14
Derivar e integrar numéricamente, relacionar estos conceptos numéricos y analíticos y entender lo porque de su necesidad.	A3 A5	C19 C22 C29	D3 D4 D5 D6 D7 D9 D12 D13 D14
Manejar ajustes de datos a distintos tipos de curvas de elección previa mediante paquetes informáticos.	A3 A5	C19 C22 C29	D3 D4 D5 D6 D7 D9 D12 D13 D14

Contenidos

Tema		
Tema 1. *Introducción el análisis *numérica.	Sistemas de numeración Necesidad de los métodos numéricos. Fontes y análisis del error. Software *disponible.	
Tema 2. Aproximación de raíces de ecuaciones de una variable.	Condicionamiento del cálculo de raíces. Métodos de separación de raíces- Método de la *bisección. Método de Newton-*Raphson. *Teorema del punto hizo.	
Tema 3. *Interpolación numérica.	El problema general de *interpolación. *Interpolación de *Lagrange. Error de *interpolación y elección excelente de *nodos. *Interpolación *polinomial.	
Tema 4. Ajuste de curvas.	Ajuste de datos. Rectas de regresión por mínimos cuadrados. Aproximación de funciones por mínimos cuadrados. *Interpolación *polinomial a *trozos.	
Tema 5. Derivación e integración numérica.	Esquemas de derivación numérica *basados en *interpolación. Fórmulas de derivación *finitas. Error de derivación. Fórmulas de integración con *interpolación *polinómica. Error de integración. Fórmulas de *cuadraturas.	
Tema 6. Resolución numérica de sistemas de ecuaciones.	Métodos directos de resolución de sistemas lineales: *Gauss. Métodos *iterativos clásicos. Métodos de descenso: Máximo descendiendo y *gradiente conjugado. Resolución de sistemas no lineales.	

Planificación

	Horas en clase	Horas fuera de clase	Horas totales
Sesión magistral	13	26	39
Prácticas en aulas de informática	26	52	78
Pruebas de tipo test	4	12	16
Resolución de problemas y/o ejercicios	2	8	10
Trabajos y proyectos	0	7	7

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

Metodologías	
	Descripción
Sesión magistral	Exposición de las bases teóricas y orientación por parte del profesorado sobre los contenidos de la materia
Prácticas en aulas de informática	Desarrollo en las aulas de informática de los ejercicios que se propongan en las aulas teóricas utilizando la calculadora científica *MATLAB.

Atención personalizada

Metodologías	Descripción
Prácticas en aulas de informática	Los alumnos trabajarán de manera autónoma con la supervisión permanente del profesor

Evaluación

	Descripción	Calificación	Resultados de Formación y Aprendizaje	
Prácticas en aulas de informática	Al final de las sesiones en las aulas de informática, el alumno resolverá algunos ejercicios del incluso tipo que los de los realizados en el aula.	25	C19 C22 C29	D6
Pruebas de tipo test	Durante lo curso se realizarán *alomenos tres pruebas parciales cortas tipo test y tipo práctico que contarán un 25 por cien en la calificación final. Además, en una prueba final, se realizará otra prueba tipo test de *tódala materia que contabilizará otro 10 por cien en la calificación final.	35	C19 C22 C29	D6
Resolución de problemas y/o ejercicios	Al finalizar el curso *realizaráse una prueba práctica resolviendo algunos ejercicios prácticos en el aula de informática	30	C19 C22 C29	D6
Trabajos y proyectos	*Participacion con aprovechamiento en todas las actividades propuestas por el profesorado, sean estas para realizar dentro o fuera del aula.	10	C19 C22 C29	D6

Otros comentarios sobre la Evaluación

Los alumnos que no superen la materia en la convocatoria común y pretendan hacerlo en la convocatoria extraordinaria, mantendrán las calificaciones obtenidas durante lo curso en cada uno de los apartados anteriores, salvo las calificaciones de las pruebas prácticas de informática, que podrán ser recuperadas, y las pruebas realizadas al final de curso que serán evaluadas en el examen correspondiente. En este caso, el alumno tiene que ponerse en contacto con el profesor con suficiente antelación para acordar el trabajo a realizar antes de las pruebas finales.

La participación del estudiante en alguno de los actos de evaluación de la materia implicará la condición de "presentado" y, por lo tanto, la asignación de una calificación. Se consideran actos de evaluación la asistencia a las prácticas de informática (cuatro o más), la realización de alguna prueba o la entrega de un mínimo del 25% de los problemas o ejercicios encargados por el profesor.

Fuentes de información

Chapra, S.C.; Canale, R.P., **Métodos numéricos para ingenieros**, 2010,
Besada, M., **MATLAB: todo un mundo**, 2007,
Mathews, J.H.; Fink, K.D., **Métodos numéricos con MATLAB**, 2000,
Nakamura, S., **Análisis numérico y visualización gráfica con MATLAB**, 1997,

Recomendaciones

Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente

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

DATOS IDENTIFICATIVOS				
Química física II				
Asignatura	Química física II			
Código	V11G200V01403			
Titulación	Grado en Química			
Descriptores	Creditos ECTS	Seleccione	Curso	Cuatrimestre
	9	OB	2	2c
Lengua	Castellano			
Impartición	Gallego			
Departamento	Química Física			
Coordinador/a	Mosquera Castro, Ricardo Antonio			
Profesorado	Graña Rodríguez, Ana María			
	Hermida Ramón, José Manuel			
	Mosquera Castro, Ricardo Antonio			
	Pastoriza Santos, Isabel			
	Peña Gallego, María de los Ángeles			
	Pérez Juste, Ignacio			
Correo-e	mosquera@uvigo.es			
Web				
Descripción general	Aplicación de los principios y métodos de la Mecánica Cuántica al estudio de la estructura molecular y la espectroscopia.			

Competencias	
Código	
C3	Demostrar conocimiento y comprensión de hechos esenciales, conceptos, principios y teorías en: principios de la mecánica cuántica y su aplicación en la descripción de la estructura y las propiedades de átomos y moléculas
C6	Demostrar conocimiento y comprensión de hechos esenciales, conceptos, principios y teorías en: principios de termodinámica y sus aplicaciones en Química
C8	Demostrar conocimiento y comprensión de hechos esenciales, conceptos, principios y teorías en: principales técnicas de investigación estructural, incluyendo la espectroscopia
C19	Aplicar dicho conocimiento y comprensión a la resolución de problemas cuantitativos y cualitativos de naturaleza básica
C20	Evaluar, interpretar y sintetizar datos e información química
C21	Reconocer e implementar buenas prácticas científicas de medida y experimentación
C22	Procesar datos y realizar cálculo computacional relativo a información y datos químicos
C23	Presentar material y argumentos científicos de manera oral y escrita a una audiencia especializada
C27	Monitorizar, mediante observación y medida de propiedades físicas y químicas, sucesos o cambios y documentarlos y registrarlos de manera sistemática y fiable
C28	Interpretar datos derivados de las observaciones y mediciones del laboratorio en términos de su significado y relacionarlos con la teoría adecuada
C29	Demostrar habilidades para los cálculos numéricos y la interpretación de los datos experimentais, con especial énfasis en la precisión y la exactitud
D1	Comunicarse de forma oral y escrita en al menos una de las lenguas oficiales de la Universidad
D3	Aprender de forma autónoma
D4	Buscar y gestionar información procedente de distintas fuentes
D5	Utilizar las tecnologías de la información y de las comunicaciones y manejar herramientas informáticas básicas
D6	Manejar las matemáticas, incluyendo aspectos tales como análisis de errores, estimaciones de órdenes de magnitud, uso correcto de unidades y modos de presentación de datos
D7	Aplicar los conocimientos teóricos a la práctica
D8	Trabajar en equipo
D9	Trabajar de forma autónoma
D12	Planificar y gestionar adecuadamente el tiempo
D13	Tomar decisiones
D14	Analizar y sintetizar información y obtener conclusiones
D15	Evaluar de modo crítico y constructivo su entorno y a sí mismo

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

Formular hamiltonianos moleculares, utilizar sobre ellos la aproximación de Born-Oppenheimer y discutir sus consecuencias.	C3	D1
	C20	D3
	C22	D4
	C23	D5
		D6
		D7
		D9
		D12
Manejar superficies y perfiles de energía potencial y los conceptos relativos a ellas.		D13
		D14
	C3	D1
	C19	D3
	C20	D4
	C22	D5
	C28	D6
	C29	D7
Aplicar los métodos OM y EV para la descripción del enlace químico en sistemas simples y conocer (con su origen) las limitaciones de estos métodos.		D9
		D12
		D13
		D14
	C3	D1
	C8	D3
	C19	D4
	C20	D5
Describir las técnicas de localización orbital y el fundamento de la hibridación de orbitales atómicos.	C21	D6
	C22	D7
	C23	D9
	C27	D12
	C28	D13
	C29	D14
		D15
	C3	D1
Aplicar (conociendo fundamentos y limitaciones) los principales métodos de cálculo para el estudio de estructuras moleculares (HF, DFT, post-HF).		D3
		D4
		D6
		D9
	C3	D1
	C19	D3
	C20	D4
	C22	D5
Describir las formas de interacción radiación-materia y formular reglas de selección de dipolo eléctrico.	C23	D6
	C28	D7
	C29	D9
		D12
		D13
		D14
	C8	D1
		D3
Vincular la frecuencia de la radiación con el movimiento molecular responsable de una transición espectroscópica.		D4
		D6
		D9
	C8	D1
		D3
		D4
		D6
		D7
Justificar el ensanchamiento de las líneas espectrales y el efecto del medio sobre los espectros.		D9
	C8	D1
		D3
		D4
		D6
		D9

Interpretar espectros de rotación y vibración-rotación para obtener información estructural, haciendo uso de los modelos cuánticos simples (rotor rígido y flexible y osciladores armónico y anarmónico), reglas de selección y técnicas de asignación de líneas.	C3 C8 C19 C20 C22 C23 C27 C28 C29	D1 D3 D4 D5 D6 D7 D9 D12 D13 D14
Discutir el principio de Franck-Condon y sus consecuencias.	C3 C8	D1 D3 D4 D6 D9
Interpretar espectros electrónicos y fotoelectrónicos, determinando información estructural a partir de ellos, y conocer sus fundamentos.	C3 C8 C19 C22	D1 D3 D4 D5 D6 D7 D9
Describir los diferentes procesos de desactivación de estados electrónicos excitados y representarlos en un diagrama de Jablonski.	C8 C19	D1 D3 D4 D6 D9
Describir los fundamentos de las espectroscopias de resonancia magnética e interpretar el origen físico del desplazamiento químico y de los acoplamientos presentes en los espectros de RMN.	C8 C19 C22	D1 D3 D4 D6 D9
Describir las peculiaridades instrumentales de las técnicas espectroscópicas en las diferentes regiones espectrales, así como los fundamentos y aplicaciones del láser y de las técnicas basadas en la transformada de Fourier.	C8	D1 D3 D4 D6 D9
Aplicar los conocimientos teóricos adquiridos en Química Física I para determinar experimentalmente constantes de equilibrio químico, coeficientes de actividad y magnitudes termoquímicas.	C6 C19 C20 C21 C23 C27 C28 C29	D1 D3 D4 D5 D6 D7 D8 D9 D12 D13 D14 D15

Nueva

Contenidos

Tema

Introducción a la teoría de grupos de simetría en química	- Elementos y operaciones de simetría. - Grupos puntuales de simetría. - Representaciones matriciales. - Representaciones irreducibles. Tablas de caracteres. - Aplicaciones químicas.
Aspectos cualitativos de la estructura electrónica molecular.	- Aproximación de Born-Oppenheimer. - Molécula H ₂ ⁺ . - Método OM para moléculas diatómicas homo y heteronucleares. - Método OM en moléculas poliatómicas. - Método EV.
Tratamientos cuantitativos para el estudio de la estructura electrónica molecular.	- Método Hartree-Fock. - Métodos post-Hartree-Fock. - Métodos semiempíricos. - Cálculo de propiedades moleculares

Introducción a la Espectroscopia Molecular.	- Interacción radiación-materia. Planteamiento general. - Integral momento dipolar de transición. Reglas de selección. - Intensidad y posición de las transiciones espectrales. - Instrumentación.
Espectroscopia de Rotación.	- Espectros de rotación pura de moléculas diatómicas. Modelos del rotor rígido y elástico. - Espectros de rotación pura de moléculas poliatómicas. - Espectros Raman de rotación pura. - Instrumentación y aplicaciones.
Espectroscopia de Vibración-rotación.	- Espectros de vibración-rotación de moléculas diatómicas. Modelos del oscilador armónico y anarmónico con rotación dependiente de la vibración. - Espectros de vibración-rotación de moléculas poliatómicas. - Espectroscopia Raman de vibración-rotación. - Instrumentación y aplicaciones.
Espectroscopia Electrónica.	- Estados electrónicos de las moléculas. - Estructura de vibración-rotación. Principio de Franck-Condon. - Grupos cromóforos y auxocromos. - Procesos de desactivación electrónica. - Instrumentación y aplicaciones. - Láseres. - Espectroscopia fotoelectrónica y relacionadas.
Espectroscopias de Resonancia.	- Introducción a la resonancia magnética. - Desplazamiento químico. - Interacción espín-espín. Constante de acoplamiento. - Espectroscopia de resonancia de espín electrónico.
Prácticas de Termodinámica Química (seis sesiones)	- Determinación experimental de constantes de equilibrio empleando técnicas espectrofotométricas o potenciométricas. - Determinación experimental de entalpías de combustión, disolución, neutralización, fusión o vaporización. - Propiedades coligativas. - Determinación experimental de coeficientes de actividad empleando una técnica potenciométrica.
Prácticas de Química Cuántica y Espectroscopia (siete sesiones).	- Estudio computacional de la estructura electrónica de diferentes moléculas - Estudio computacional de isomería conformacional. - Estudio computacional de procesos químicos simples. - Predicción, interpretación teórica y resolución del espectro de vibración-rotación del HCl en fase gas. - Espectroscopia electrónica: Espectro de la molécula de I₂ en fase gas.

Planificación

	Horas en clase	Horas fuera de clase	Horas totales
Sesión magistral	26	39	65
Seminarios	26	39	65
Prácticas de laboratorio	45.5	4.5	50
Resolución de problemas y/o ejercicios de forma autónoma	0	10	10
Pruebas de respuesta larga, de desarrollo	4	8	12
Informes/memorias de prácticas	0	9	9
Pruebas de respuesta corta	2	5	7
Pruebas de tipo test	0	4	4
Pruebas prácticas, de ejecución de tareas reales y/o simuladas.	1	2	3

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

Metodologías

	Descripción
Sesión magistral	Consistirán en la exposición de los aspectos fundamentales de cada tema por parte del profesor, tomando como base el material disponible en la plataforma TEM@ (esquemas, boletines de problemas, ...). Además de la exposición de temas, también se formularán problemas numéricos que ayuden a comprender y asentar los conceptos.

Seminarios	Las clases de seminario serán principalmente labor del alumno, bajo la supervisión del profesor, y se emplearán fundamentalmente para: - Resolución de problemas, tanto de manera individual como en grupo. - Incidir, una vez el alumno trabaje los aspectos básicos, sobre aquellos contenidos de cada tema que puedan presentar una mayor complejidad.
Prácticas de laboratorio	Realización bajo la supervisión del profesor pero de manera autónoma, de prácticas de laboratorio o de química computacional. Las dichas prácticas se realizarán por parejas y en sesiones de 3,5 horas. Con la antelación suficiente, los alumnos dispondrán en la plataforma TEM@ de los guiones de las prácticas a realizar junto con todo el material adicional necesario. El guion presentará los elementos esenciales para realizar la práctica a nivel experimental o computacional, así como los puntos básicos de su fundamento teórico y del tratamiento de los datos. Al finalizar las prácticas, y dentro del plazo que fije el profesor, será necesario entregar el correspondiente informe, elaborado siguiendo las directrices dadas por el profesor.
Resolución de problemas y/o ejercicios de forma autónoma	Para cada uno de los temas, se propondrán determinados "Problemas Evaluables" u otros trabajos que el alumno deberá resolver o realizar para entregar al profesor en el plazo que se fije.

Atención personalizada

Metodologías	Descripción
Sesión magistral	En el horario de tutorías del profesor se resolverán de forma individualizada y más personal aquellas dudas de los alumnos que puedan surgir al largo del curso en cualquiera de sus aspectos (clases de teoría o seminario, clases de laboratorio y los distintos tipos de actividades autónomas a realizar).
Seminarios	En el horario de tutorías del profesor se resolverán de forma individualizada y más personal aquellas dudas de los alumnos que puedan surgir al largo del curso en cualquiera de sus aspectos (clases de teoría o seminario, clases de laboratorio y los distintos tipos de actividades autónomas a realizar).
Prácticas de laboratorio	En el horario de tutorías del profesor se resolverán de forma individualizada y más personal aquellas dudas de los alumnos que puedan surgir al largo del curso en cualquiera de sus aspectos (clases de teoría o seminario, clases de laboratorio y los distintos tipos de actividades autónomas a realizar).
Resolución de problemas y/o ejercicios de forma autónoma	En el horario de tutorías del profesor se resolverán de forma individualizada y más personal aquellas dudas de los alumnos que puedan surgir al largo del curso en cualquiera de sus aspectos (clases de teoría o seminario, clases de laboratorio y los distintos tipos de actividades autónomas a realizar).
Pruebas	Descripción
Pruebas de respuesta larga, de desarrollo	En el horario de tutorías del profesor se resolverán de forma individualizada y más personal aquellas dudas de los alumnos que puedan surgir al largo del curso en cualquiera de sus aspectos (clases de teoría o seminario, clases de laboratorio y los distintos tipos de actividades autónomas a realizar).
Informes/memorias de prácticas	En el horario de tutorías del profesor se resolverán de forma individualizada y más personal aquellas dudas de los alumnos que puedan surgir al largo del curso en cualquiera de sus aspectos (clases de teoría o seminario, clases de laboratorio y los distintos tipos de actividades autónomas a realizar).
Pruebas de respuesta corta	En el horario de tutorías del profesor se resolverán de forma individualizada y más personal aquellas dudas de los alumnos que puedan surgir al largo del curso en cualquiera de sus aspectos (clases de teoría o seminario, clases de laboratorio y los distintos tipos de actividades autónomas a realizar).
Pruebas de tipo test	En el horario de tutorías del profesor se resolverán de forma individualizada y más personal aquellas dudas de los alumnos que puedan surgir al largo del curso en cualquiera de sus aspectos (clases de teoría o seminario, clases de laboratorio y los distintos tipos de actividades autónomas a realizar).
Pruebas prácticas, de ejecución de tareas reales y/o simuladas.	En el horario de tutorías del profesor se resolverán de forma individualizada y más personal aquellas dudas de los alumnos que puedan surgir al largo del curso en cualquiera de sus aspectos (clases de teoría o seminario, clases de laboratorio y los distintos tipos de actividades autónomas a realizar).

Evaluación

Descripción	Calificación	Resultados de Formación y Aprendizaje
-------------	--------------	---------------------------------------

Prácticas de laboratorio	Se puntúan aquí junto con el esfuerzo y la actitud, las destrezas y las competencias desarrolladas por el alumno durante la realización de las distintas prácticas.	ata 10,0	C3 C6 C8 C19 C20 C21 C22 C27 C28	D1 D4 D5 D6 D7 D8 D12 D13 D14 D15
Resolución de problemas y/o ejercicios de forma autónoma	Para cada uno de los temas o grupos de temas, se propondrán determinados "Problemas Evaluables" u otros trabajos que el alumno deberá resolver o realizar.	ata 3,75	C3 C8 C19 C20 C22 C23	D1 D3 D4 D5 D6 D9 D12 D13 D14 D15
Pruebas de respuesta larga, de desarrollo	Realización de una prueba escritura global al final del cuatrimestre, en la fecha fijada por la Junta de Facultad.	como mínimo 52,5	C3 C8 C19 C20 C22	D1 D3 D6 D9 D12 D14 D15
Informes/memorias de prácticas	Se realizará el informe de una práctica propuesta por los profesores que se deberá presentar cuidando los aspectos formales relativos a la organización, uso correcto de las unidades, confección correcta de las gráficas y exposición de los resultados. Se valorará también el análisis crítico de estos y la obtención de conclusiones. Además se evaluarán todas las prácticas realizadas mediante cuestiones orales que los alumnos podrán responder a la vista de su libreta de laboratorio.	ata 5,0	C3 C6 C8 C19 C20 C22 C23 C27 C28 C29	D1 D3 D4 D5 D6 D8 D9 D12 D14 D15
Pruebas de respuesta corta	Realización a lo largo del cuatrimestre, en las fechas fijadas por la Junta de Facultad, de dos pruebas cortas de carácter no liberatorio.	hasta 15	C3 C8 C19 C20 C22	D1 D3 D6 D9 D12 D14 D15
Pruebas de tipo test	Al finalizar cada tema o grupo de temas el alumno tendrá, a través de la plataforma TEM@, la posibilidad de responder un "test de autoevaluación" autocorregible.	ata 3,75	C3 C8 C19	D3 D4 D6 D7 D9 D12 D14 D15
Pruebas prácticas, de ejecución de tareas reales y/o simuladas.	Esta prueba escrita se realizará en la fecha fijada por la Xunta de Facultad y versará sobre los conocimientos y destrezas que el alumno debe haber adquirido durante el desarrollo de las sesiones de prácticas. Las preguntas se situarán, en algunos casos, en el contexto de algunas de las experiencias realizadas por el alumno y, en otros, tendrán un ámbito más general. A través de las dichas preguntas se evaluará su capacidad para resolver los problemas presentados.	ata 10,0	C3 C6 C8 C19 C21 C22 C28 C29	D1 D3 D4 D6 D7 D9 D12 D13 D14 D15

Otros comentarios sobre la Evaluación

La evaluación del curso tendrá en cuenta los aspectos mencionados mas arriba, distinguiendo entre la parte teórica y la parte práctica de la asignatura.

Parte Teórica: Su evaluación supondrá, en su conjunto (pruebas cortas (20%), prueba larga (70%), resolución

deproblemas/trabajos (5%), test de autoevaluación (5%)), un 75% de la calificación final de la materia.

Es requisito imprescindible para superar la materia obtener en la prueba larga una calificación mínima de 4,0 sobre 10,0 puntos. En el caso de no alcanzar dicha puntuación la calificación que se reflejará en el acta será únicamente la calificación de este examen, no contabilizándose ninguno de los demás apartados.

Además, será necesario obtener un promedio de 3,0 en las cuestiones indicadas como teóricas en los exámenes (pruebas cortas y larga). Si no se alcanzase esta puntuación la nota reflejada en el acta no podrá superar 4,0.

Parte Práctica: Su evaluación contribuirá, en su conjunto (prácticas de laboratorio (40%), informes y cuestiones orales(20%) y prueba escrita de prácticas (40%)), un 25% a la calificación final de la materia.

Es requisito imprescindible para superar la materia obtener en la parte práctica una calificación mínima de 5,0 sobre 10 puntos. En el caso de no alcanzar dicha puntuación la calificación que se reflejará en el acta no podrá superar 4,0.

La asistencia a las sesiones prácticas es obligatoria (se admitirán ausencias a sesiones debidamente justificadas) y, por lo tanto, no es posible aprobar la materia en el caso de no haberlas realizado.

Condición de presentado/no presentado: La realización de las dos pruebas cortas, o de la prueba escrita de prácticas, o de la prueba larga o la asistencia a mas de cinco sesiones de laboratorio, implicará la condición de "presentado/a" y, por lo tanto, la asignación de una calificación.

Segunda Oportunidad: Para la evaluación en la segunda oportunidad, se mantendrán las calificaciones y los porcentajes de las pruebas cortas, de los problemas/trabajos propuestos, de las prácticas de laboratorio y los correspondientes informes y de los test de autoevaluación. En el caso de tener una calificación igual o superior a 5,0 puntos en la prueba global (larga) o igual o superior a 4,0 en la prueba escrita de prácticas, se mantendrá dicha calificación (y el porcentaje) y solo será necesario realizar a otra.

Fuentes de información

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

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

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

Bibliografía Complementaria:

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

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

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

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

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

Libros de problemas:

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

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

Libros de prácticas:

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

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

Recomendaciones

Asignaturas que se recomienda cursar simultáneamente

Herramientas informáticas y de comunicación en química/V11G200V01401

Métodos numéricos en química/V11G200V01402

Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente

Matemáticas: Matemáticas I/V11G200V01104

Matemáticas: Matemáticas II/V11G200V01203

Física III/V11G200V01301

Química física I/V11G200V01303

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

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

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

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

Contenidos

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

Práctica 9-10	Obtención y reactividad de compuestos del grupo 14.
Práctica 11-12	Obtención y reactividad de compuestos del grupo 13.

Planificación			
	Horas en clase	Horas fuera de clase	Horas totales
Sesión magistral	26	15	41
Resolución de problemas y/o ejercicios	26	20	46
Prácticas de laboratorio	45.5	5.5	51
Pruebas de respuesta larga, de desarrollo	4	70	74
Pruebas prácticas, de ejecución de tareas reales y/o simuladas.	3	10	13

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

Metodologías	
	Descripción
Sesión magistral	Exposición por parte del profesor sobre el tema a desarrollar, haciendo especial énfasis en los aspectos más importantes o de difícil comprensión para el alumno. El profesor/a utilizará la plataforma Tem@ para dar información sobre la materia o sobre su desarrollo.
Resolución de problemas y/o ejercicios	Se dedicarán dos horas semanales para discutir y resolver cuestiones sobre la materia que previamente el alumno tendrá que trabajar.
Prácticas de laboratorio	Los experimentos se realizarán a lo largo de 13 sesiones de 3,5 horas cada una. El alumno dispondrá de los guiones de prácticas así como del material de apoyo en la plataforma tem@ con el fin de que pueda tener conocimiento previo de los experimentos a realizar. El alumno deberá elaborar el cuaderno de laboratorio durante la realización de las prácticas.

Atención personalizada	
Metodologías	Descripción
Resolución de problemas y/o ejercicios	

Evaluación				
	Descripción	Calificación	Resultados de Formación y Aprendizaje	
Resolución de problemas y/o ejercicios	Se valorará la resolución por parte del alumno de una serie de problemas y/o ejercicios propuestos en el tiempo/condiciones establecido/as por el profesor. La puntuación será considerada si en cada una de las pruebas eliminatorias se alcanza una calificación igual o superior a 5 puntos sobre 10.	15	C1 C2 C9 C12 C14 C23	D1 D3 D4 D6 D7 D9 D13
Prácticas de laboratorio	Es obligatoria la asistencia a las sesiones de laboratorio. El profesor realizará un seguimiento del trabajo experimental realizado por el alumno en las sesiones de laboratorio, así como del cuaderno elaborado (10%). Se realizará una prueba que permitirá evaluar las competencias y destrezas adquiridas por el alumno (15%). La puntuación será considerada si en cada una de las pruebas eliminatorias se alcanza una calificación igual o superior a 5 puntos sobre 10.	25	C25 C26 C27 C28	D4 D5 D6 D7 D8 D9 D12 D13 D14 D15
Pruebas de respuesta larga, de desarrollo	2 Pruebas sobre aspectos concretos de los contenidos explicados en clase y seminarios. Cada prueba podrá ser eliminatoria cuando el alumno alcance una calificación mínima de 5 puntos sobre 10. Para poder aprobar la materia, el alumno deberá alcanzar en cada una de las pruebas eliminatorias una calificación mínima de 5 puntos sobre 10.	60	C1 C2 C9 C12 C14 C20	D1 D6 D7

Otros comentarios sobre la Evaluación

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

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

Los alumnos podrán realizar una Prueba Final, que podrá tener un valor de hasta un 60 %, en la fecha de cierre de evaluación de la convocatoria de mayo-junio cuando requieran:

- Superar alguna de las pruebas eliminatorias.
- Subir la nota de las pruebas eliminatorias que le permita alcanzar los mínimos requeridos para aprobar la materia.
- Subir la nota en las pruebas eliminatorias para mejorar la nota final de la materia.

Convocatoria de Julio. Los alumnos que no superen la materia al final del cuatrimestre deberán hacer una prueba escrita en el periodo de cierre de evaluación de la convocatoria de julio. Dicha prueba sustituirá los resultados de las pruebas eliminatorias realizadas a lo largo del cuatrimestre y tendrá un valor de hasta un 60 %. La calificación de resolución de problemas y prácticas de laboratorio obtenida a lo largo del cuatrimestre se mantiene.

Fuentes de información

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

Recomendaciones

Asignaturas que se recomienda cursar simultáneamente

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

Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente

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