



Facultad de Química

(*)Centro

(*)

A Universidade de Vigo ven impartindo dende a súa creación no ano 1990 estudos de química, tanto de licenciatura como de doutoramento. Na Facultade de Química, creada en outubro de 2003 por segregación da antiga Facultade de Ciencias, impártense actualmente todas as titulacións, relacionadas coa química na Universidade de Vigo. Así, por unha banda, estanse a impartir os últimos cursos da licenciatura en química, xa en proceso de extinción. Pola outra, estase en proceso de implantación do novo grao en química e xa están funcionando, completamente implantados, os novos mestrados e doutoramentos. Tanto grao como mestrados e doutoramentos están plenamente adaptados ao espazo europeo de educación superior (EEES).

Servizos do centro:

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

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

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

(*)calendario académico

(*)

Máster Universitario en Química Teórica y Modelización Computacional. R.D. 1393/2007

Asignaturas

Curso 2

Código	Nombre	Cuatrimestre	Cr.totales
V11M030V01101	Teoría Avanzada de la Estructura Electrónica y de la Materia Condensada	1c	9

V11M030V01102	Dinámica Química y Molecular y Modelización por ordenador	1c	9
V11M030V01103	Técnicas Computacionales Avanzadas	1c	6
V11M030V01106	Aplicaciones	1c	6
V11M030V01201	Tesis de Máster	2c	30

DATOS IDENTIFICATIVOS**Teoría Avanzada de la Estructura Electrónica y de la Materia Condensada**

Asignatura	Teoría Avanzada de la Estructura Electrónica y de la Materia Condensada			
Código	V11M030V01101			
Titulacion	Máster Universitario en Química Teórica y Modelización Computacional. R.D. 1393/2007			
Descriptores	Creditos ECTS 9	Seleccione OB	Curso 2	Cuatrimestre 1c
Lengua Impartición	Departamento Química física Coordinador/a Flores Rodriguez, Jesus Ramon Profesorado Flores Rodriguez, Jesus Ramon Correo-e flores@uvigo.es			

----- GUÍA DOCENTE NO PUBLICADA -----

DATOS IDENTIFICATIVOS**Dinámica Química y Molecular y Modelización por ordenador**

Asignatura	Dinámica Química y Molecular y Modelización por ordenador			
Código	V11M030V01102			
Titulacion	Máster Universitario en Química Teórica y Modelización Computacional. R.D. 1393/2007			
Descriptores	Creditos ECTS 9	Seleccione OB	Curso 2	Cuatrimestre 1c
Lengua				
Impartición				
Departamento	Química física			
Coordinador/a	Flores Rodriguez, Jesus Ramon			
Profesorado	Flores Rodriguez, Jesus Ramon			
Correo-e	flores@uvigo.es			

----- GUÍA DOCENTE NO PUBLICADA -----

DATOS IDENTIFICATIVOS**Técnicas Computacionales Avanzadas**

Asignatura	Técnicas Computacionales Avanzadas			
Código	V11M030V01103			
Titulacion	Máster Universitario en Química Teórica y Modelización Computacional. R.D. 1393/2007			
Descriptores	Creditos ECTS 6	Seleccione OB	Curso 2	Cuatrimestre 1c
Lengua				
Impartición				
Departamento	Química física			
Coordinador/a	Flores Rodriguez, Jesus Ramon			
Profesorado	Flores Rodriguez, Jesus Ramon			
Correo-e	flores@uvigo.es			

----- GUÍA DOCENTE NO PUBLICADA -----

DATOS IDENTIFICATIVOS**Aplicaciones**

Asignatura	Aplicaciones			
Código	V11M030V01106			
Titulacion	Máster Universitario en Química Teórica y Modelización Computacional. R.D. 1393/2007			
Descriptores	Creditos ECTS 6	Seleccione OB	Curso 2	Cuatrimestre 1c
Lengua				
Impartición				
Departamento	Química física			
Coordinador/a	Flores Rodriguez, Jesus Ramon			
Profesorado	Flores Rodriguez, Jesus Ramon			
Correo-e	flores@uvigo.es			

----- GUÍA DOCENTE NO PUBLICADA -----

DATOS IDENTIFICATIVOS**Tese de Máster**

Asignatura	Tese de Máster			
Código	V11M030V01201			
Titulacion	Máster Universitario en Química Teórica e Modelización Computacional. R.D. 1393/2007			
Descriptores	Creditos ECTS 30	Seleccione OB	Curso 2	Cuatrimestre 2c
Lengua				
Impartición				
Departamento	Química física			
Coordinador/a	Mosquera Castro, Ricardo Antonio			
Profesorado	Mosquera Castro, Ricardo Antonio			
Correo-e	mosquera@uvigo.es			
Web				
Descripción general	Introduction to research through a simple research project			

Competencias de titulación

Código			
A2	Adquirir formación en los métodos de modelización		
A3	Aplicar los métodos teóricos y de modelización a sistemas químicos en general		
A4	Aplicar los métodos teóricos y de modelización a sistemas bioquímicos		
A5	Aplicar los métodos teóricos al estudio de la reactividad y la catálisis		
A6	Aplicar los métodos teóricos y de modelización a la Química Atmosférica y a la Astroquímica		
A7	Aplicar los métodos teóricos y de modelización a la Nanociencia		
A8	Aplicar los métodos teóricos y de modelización al diseño de materiales		
B1	Mejorar la comunicación oral y escrita en Inglés u otros idiomas europeos		
B7	Ser capaz de obtener y manejar bibliografía científico técnica		

Competencias de materia

Resultados previstos en la materia	Tipología	Resultados de Formación y Aprendizaje
To learn how to tackle chemical problems by designing a suitable computational strategy	saber hacer	A2 A3 A4 A5 A6 A1 A2
To compile all the pertinent bibliographic references and to select the most relevant information.	saber hacer	B1
To learn how to dimension the required computations according to the existing hardware and software resources.	saber hacer	A3 A4 A5 A6 A1 A2
To carry out the necessary computations, discuss critically the results and re-design the computational strategy if needed.		A3 A4 A5 A6 A1 A2
To write a detailed report on the methods and results and defend it in public in front of a tribunal.	saber hacer	B1

Contidos

Tema
Planteamiento del problema

Diseño de la estrategia

(*)Theoretical analysis and Computation	(*)
(*)Data analysis and report writing.	(*)

Planificación

	Horas en clase	Horas fuera de clase	Horas totales
Proyectos	600	50	650
Traballos e proxectos	2	98	100

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

Metodoloxía docente

	Descripción
Proyectos	A simple research project. Thre results are presented in a detailed written report and in a public talk in front of a tribunal.

Atención personalizada**Metodologías Descripción**

Proyectos	 The student gets help in every step of the process (assessment of the literature, design of the computational method, practical aspects of the computations, and the writing of the report and its presentation as a short talk).
-----------	---

Avaluación

	Descripción	Calificación
Proyectos	Assessment of the design and execution of the research project by the tutor(s)	85
Traballos e proxectos	Assessment of the report and talk given by the student following the tribunal's recommendation.	15

Otros comentarios sobre la Evaluación

Assessment of the report and talk given by the student following the tribunal's recommendation.

Bibliografía. Fontes de información

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

Any relevant reference to the particular project proposed by the tutor.

Recomendación