



(*)Facultade de Química

(*)Facultade de Química

(*)

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



Enlace á páxina web da Facultade de Química:

<http://quimica.uvigo.es>

Titulacións impartidas no centro

- Grao en Química
- Másteres e Doutoramentos:
 - Química Avanzada / Ciencia e Tecnoloxía Química (interuniversitario con *Mención hacia la Excelencia*)
 - Química Teórica e Modelización Computacional (interuniversitario con *Mención hacia la Excelencia*)
 - Ciencia e Tecnoloxía de Coloides e Interfases (interuniversitario con *Mención hacia la Excelencia*)
- Máster profesionalizante:
 - Ciencia e Tecnoloxía de Conservación de Produtos da Pesca
- Licenciatura en Química

Servizos do centro

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

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

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

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

(*)Calendario académico(*)

Calendario do curso 2012-13 na Facultade de Química

(*)Grao en Química**Subjects****Year 2nd**

Code	Name	Quadmester	Total Cr.
V11G200V01301		1st	6
V11G200V01302		1st	9
V11G200V01303		1st	6
V11G200V01304		1st	9
V11G200V01401		2nd	6
V11G200V01402		2nd	6
V11G200V01403		2nd	9
V11G200V01404		2nd	9

IDENTIFYING DATA**Física III**

Subject	Física III			
Code	V11G200V01301			
Study programme	Grao en Química			
Descriptors	ECTS Credits 6	Choose Mandatory	Year 2	Quadmester 1c
Teaching language	Castelán			
Department	Física aplicada Química física			
Coordinator	Mosquera Castro, Ricardo Antonio			
Lecturers	Martinez Piñeiro, Manuel Mosquera Castro, Ricardo Antonio			
E-mail	mosquera@uvigo.es			
Web				
General description	A materia pretende ser unha introducción á Mecánica Cuántica e a Mecánica Estadística orientada as súas aplicacións en Química.			

Competencias de titulación

Code	
A3	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: principios da Mecánica Cuántica e a súa aplicación na descripción da estrutura e as propiedades de átomos e moléculas
A14	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: relación entre propiedades macroscópicas e propiedades de átomos e moléculas individuais, incluíndo as macromoléculas
A19	Aplicar os coñecementos e a comprensión á resolución de problemas cuantitativos e cualitativos de natureza básica
A20	Avaliar, interpretar e sintetizar datos e información química
A22	Procesar datos e realizar cálculo computacional relativo a información e datos químicos
A23	Presentar material e argumentos científicos de xeito oral e escrita a unha audiencia especializada
B4	Procurar e administrar información procedente de distintas fontes
B6	Manexar as matemáticas, incluíndo aspectos tales como análise de erros, estimacións de ordes de magnitud, uso correcto de unidades e modos de presentación de datos
B7	Aplicar os coñecementos teóricos á práctica
B9	Traballar de forma autónoma
B14	Analizar e sintetizar información e obter conclusións
B15	Avaliar de modo crítico e construtivo o entorno e a si mesmo

Competencias de materia

Expected results from this subject	Training and Learning Results
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.	A3 B14
Derivar la ecuación de propagación de una onda electromagnética, caracterizada a través de sus principales características. Relacionar este concepto con el espectro electromagnético.	A3 B14
Derivar la ecuación de propagación de una onda electromagnética, caracterizada a través de sus principales características. Relacionar este concepto con el espectro electromagnético.	A3 B14
Enunciar los postulados de la Mecánica Cuántica y sus consecuencias en la reformulación de la teoría microscópica de la Física Clásica.	A3 B14 B15
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.	A3 B9 A19 B14
Escribir los operadores fundamentales de la Mecánica Cuántica (posición, momento lineal y angular, hamiltoniano de sistemas sencillos).	A3 B9 A19 B14
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.	A3 B6 A19 B14
Calcular las funciones y valores propios del operador de momento angular.	A3 B6 A19 B14
Resolver las ecuaciones de onda del átomo de hidrógeno, calculando sus orbitales.	A3 B6 A19 B14
Resolver la ecuación de Schrödinger para átomos polielectrónicos mediante métodos aproximados.	A3 B6 A19 B14 A20

Explicar de forma sencilla las transiciones entre estados y los espectros de emisión o absorción resultantes.	A3 A19 A20 A22 A23	B6 B9 B14 B15
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.	A14 A20 A22 A23	B6 B14
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.	A14 A19	B4 B6 B7

Contidos

Topic

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	Introducción Revisión de conceptos previos Fundamentos matemáticos Postulados de la Mecánica Cuántica Relación de indeterminación de Heisenberg
Estudio mecano-cuántico de sistemas modelo	Introducción. Partícula en una caja de potencial. Oscilador armónico. Momento angular. Rotor rígido.
Métodos aproximados	Introducción. Método de variaciones. Método de perturbaciones. Comparación de ambos métodos.
Átomos hidrogénicos	Introducción. Resolución de la parte radial de la ecuación de Schrödinger. Orbitales hidrogénicos. Espín electrónico. Acoplamiento espín-órbita. Estructura hiperfina. Espectros atómicos.
Átomos polielectrónicos	Aproximación de electrones independientes. Principio de antisimetría. Orbitales de Slater. Funciones base. Método SCF-HF. Términos y niveles electrónicos. Espectros atómicos
Mecánica Estadística	Nomenclatura y postulados. Colectivo canónico. Función de partición canónica para un sistema de partículas no interaccionantes. Ley de distribución de Boltzmann para partículas no interaccionantes. Términos de la función de partición de un gas ideal. Termodinámica estadística de gases ideales. Termodinámica estadística de sistemas reales: fuerzas intermoleculares e integral de configuración.

Planificación

	Class hours	Hours outside the classroom	Total hours
Sesión magistral	27	44.5	71.5
Resolución de problemas e/ou exercícios	13	45.5	58.5
Probas de resposta curta	4	6	10
Probas de resposta longa, de desenvolvimento	4	6	10

*The information in the planning table is for guidance only and does not take into account the heterogeneity of the students.

Metodoloxía docente	
	Description
Sesión maxistral	Presentación dos temas por parte do profesor.
Resolución de problemas e/ou exercicios	Resolución individual ou en grupo de problemas e cuestiós, tanto titorizado polo profesor na aula como traballo autónomo do alumno.

Atención personalizada	
Methodologies	Description
Sesión maxistral	Respostas as preguntas relacionadas coa materia que plantexen os alumnos nas clases de resolución de problemas e nas titorías. Os alumnos coñecerán dende principio de curso os horarios de titorías de tódolos profesores da materia. Nas titorías os alumnos poderán revisa-los seus exames.
Resolución de problemas e/ou exercicios	Respostas as preguntas relacionadas coa materia que plantexen os alumnos nas clases de resolución de problemas e nas titorías. Os alumnos coñecerán dende principio de curso os horarios de titorías de tódolos profesores da materia. Nas titorías os alumnos poderán revisa-los seus exames.
Tests	Description
Probas de resposta longa, de desenvolvemento	
Probas de respuesta curta	

Avaliación		Description	Qualification
Resolución de problemas e/ou exercicios	Básicamente se centrará en la resolución de ejercicios en el aula. No obstante, se podrá tambien pedir al alumno que entregue ejercicios propuestos y que el resuelva de manera autónoma. En este caso el profesor podrá pedir al alumno que le explique individualmente como ha resuelto el ejercicio.		10
Probas de respuesta curta	Celebraranse probas de respuesta curta polo total da asignatura		45
Probas de respuesta longa, de desenvolvemento	O remata-lo curso celebrarase unha proba completa.		45

Other comments on the Evaluation

Durante el curso se realizarán dos pruebas cortas que contendrán problemas y cuestiones. La primera sobre los temas 1-4 y la segunda sobre los temas 5-7. Además se realizará un examen de toda la asignatura, en el que todos los alumnos realizarán la prueba corta del tema 8.

De manera voluntaria, los alumnos podrán obtener puntos adicionales participando en la resolución de ejercicios en los seminarios o de manera activa en las clases. También podrán presentarse al 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 4 sobre 10 en el global de sus pruebas escritas para poder acumular la puntuación correspondiente a resolución de ejercicios.

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

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

Bibliografía. Fontes de información	
R. Eisberg, y R. Resnick, Física Cuantica , 1983,	
J. Bertrán y otros, Química Cuántica , 2000,	
I. N. Levine, Fisicoquímica , 2004,	
M. Alonso y E.J. Finn, Física , 1976,	

Recomendacións

Subjects that continue the syllabus

Química física II/V11G200V01403

Subjects that it is recommended to have taken before

Física: Física I/V11G200V01102

Física: Física II/V11G200V01201

Matemáticas: Matemáticas I/V11G200V01104

Matemáticas: Matemáticas II/V11G200V01203

IDENTIFYING DATA**Química analítica I**

Subject	Química analítica I			
Code	V11G200V01302			
Study programme	Grao en Química			
Descriptors	ECTS Credits 9	Choose Mandatory	Year 2	Quadmester 1c
Teaching language	Castelán			
Department	Química analítica e alimentaria			
Coordinator	Perez Cid, Benita			
Lecturers	Lavilla Beltran, Maria Isela Perez Cid, Benita			
E-mail	benita@uvigo.es			
Web				
General description	En esta asignatura se pretende que el alumno alcance una visión general del análisis químico cualitativo y cuantitativo, tanto en el aspecto teórico como aplicado, lo que le servirá de base para el aprendizaje de otras materias que se impartirán en cursos posteriores, particularmente en lo referente al diseño y aplicación de métodos analíticos más complejos.			

Competencias de titulación

Code

A1	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: aspectos principais da terminoloxía química, nomenclatura, conversións e unidades
A2	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: tipos de reacción química e as súas principais características asociadas
A4	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: fundamentos e ferramentas utilizadas na resolución de problemas analíticos e na caracterización de sustancias químicas
A17	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: metroloxía dos procesos químicos, incluíndo a xestión da calidade
A18	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: principios de Electroquímica
A19	Aplicar os coñecementos e a comprensión á resolución de problemas cuantitativos e cualitativos de natureza básica
A20	Avaliar, interpretar e sintetizar datos e información química
A21	Recoñecer e implementar boas prácticas científicas de medida e experimentación
A25	Manexar con seguridade sustancias químicas, considerando as súas propiedades físicas e químicas, incluíndo a valoración de calquera risco específico asociado co seu uso
A26	Realizar procedementos habituais de laboratorio e utilizar a instrumentación en traballos sintéticos e analíticos
A28	Interpretar datos derivados das observacións e medicións do laboratorio en termos do seu significado e relacionalos coa teoría adecuada
A29	Demostrar habilidades para os cálculos numéricos e a interpretación dos datos experimentais, con especial énfase na precisión e a exactitude
B1	Comunicarse de forma oral e escrita en polo menos unha das linguas oficiais da Universidade
B3	Aprender de forma autónoma
B4	Procurar e administrar información procedente de distintas fontes
B5	Utilizar as tecnoloxías da información e das comunicacións e manexar ferramentas informáticas básicas
B6	Manexar as matemáticas, incluíndo aspectos tales como análise de errores, estimacións de ordes de magnitude, uso correcto de unidades e modos de presentación de datos
B7	Aplicar os coñecementos teóricos á práctica
B9	Traballar de forma autónoma
B12	Planificar e administrar adecuadamente o tempo
B14	Analizar e sintetizar información e obter conclusións

Competencias de materia

Expected results from this subject	Training and Learning Results	
Reconocer la importancia de la Química Analítica en sus diferentes aplicaciones	A4 A19 A20	B1 B3 B4
Identificar las etapas fundamentales del proceso analítico como metodología para la resolución de problemas y seleccionar con criterio los distintos métodos de análisis.	A4 A19 A20	B1 B3 B4 B14

Describir las propiedades analíticas básicas (exactitud, precisión, sensibilidad y selectividad) y los tipos de errores que pueden afectar a los resultados experimentales.	A19 A20	B1 B3 B4 B6 B14
Describir los aspectos básicos del muestreo y de la preparación de muestra para la determinación de sus componentes.	A4 A19 A20	B1 B3 B4 B14
Manejar la calibración, uso y limpieza del material utilizado en el laboratorio analítico.	A21 A26	B7 B9 B12
Preparar disoluciones de concentración exacta (patrón primaria) y aproximada (patrón secundario y reactivos auxiliares) en función de su finalidad y manejar adecuadamente las unidades de concentración.	A1 A17 A21 A25	B4 B6 B7 B9 B12
Interpretar la presencia o ausencia de especies químicas en disolución mediante reacciones de identificación. Resolución de un problema analítico utilizando una sistemática de separación.	A2 A4 A19 A21 A26	B4 B7 B9 B12 B14
Describir los principios del análisis químico cuantitativo (volumétrico y gravimétrico) y sus limitaciones experimentales.	A2 A4 A20	B1 B3 B4
Identificar y evaluar la posible interacción entre reacciones concurrentes ácido-base, de complejación, precipitación y redox.	A2 A18 A19 A20	B1 B3 B4 B7 B9 B12 B14
Elaborar e interpretar curvas de valoración ácido-base, de formación de complejos, de precipitación y redox y saber seleccionar los indicadores más adecuados.	A2 A18 A19 A20	B1 B3 B4 B7 B9 B12 B14
Describir los fundamentos del análisis gravimétrico y los factores que influyen en la pureza de los precipitados.	A2 A20	B1 B3 B4 B14
LLevar a cabo, en el laboratorio, la precipitación y la separación por filtración en las determinaciones gravimétricas.	A2 A17 A19 A21 A25 A26 A28	B4 B7 B9 B12
Describir la utilización de las técnicas gravimétricas y volumétricas incluyendo el manejo adecuado del material necesario en cada caso.	A17 A19 A20 A21 A26	B4 B7 B9 B12
Manejar el cálculo sistemático en el análisis volumétrico (valoraciones directas, por retroceso e indirectas) y gravimétrico y saber interpretar los resultados obtenidos.	A20 A28 A29	B3 B5 B6 B7 B14

Contidos

Topic

(*)Química Analítica y proceso analítico	(*)Introducción a la Química Analítica. Clasificación de los métodos de análisis. El proceso analítico como metodología para la resolución de problemas analíticos.
(*)Muestreo y preparación de la muestra	(*)Muestra representativa. Preparación de la muestra para el análisis. Descomposición y disolución. Introducción a las separaciones analíticas.

(*)Evaluación de los resultados analíticos	(*)Propiedades analíticas. Errores en Química Analítica: clasificación. Estadística básica aplicada a la expresión de resultados analíticos. Comparación y rechazo de resultados.
(*)Análisis cuantitativo volumétrico y gravimétrico.	(*)Reacciones volumétricas. Disoluciones patrón. Valoraciones directas, por retroceso e indirectas. Formación, propiedades y pureza de los precipitados.
(*)Volumetrías ácido-base.	(*)Comportamiento de especies monopróticas, polipróticas y anfóteras. Curvas de valoración. Detección del punto final: indicadores ácido-base. Reactivos valorantes. Aplicaciones analíticas.
(*)Volumetrías de formación de complejos.	(*)Estabilidad de los complejos. Reacciones de enmascaramiento. Curvas de valoración. Detección del punto final: indicadores metalocrómicos. Aplicaciones analíticas.
(*)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.
(*)Volumetrías de oxidación-reducción.	(*)Factores que modifican el potencial redox. Curvas de valoración. Detección del punto final: indicadores redox e indicadores específicos.
(*)Análisis cualitativo	(*)Separación e identificación de especies químicas (3 sesiones)
(*)Análisis gravimétrico (Laboratorio)	(*)Determinación gravimétrica de níquel con dimetilgioxima. (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)	(*)Determinación de la concentración de una disolución de Na2-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 H2O2 comercial. (1 sesión)
	Determinación de cloro activo en una muestra de lejía. (1 sesión)

Planificación

	Class hours	Hours outside the classroom	Total hours
Sesión magistral	27	42	69
Resolución de problemas e/ou exercícios	13	31	44
Prácticas de laboratorio	45.5	4.5	50
Informes/memorias de prácticas	3	34	37
Probas de resposta curta	2	5	7
Probas de resposta longa, de desenvolvimento	3.5	8	11.5
Probas prácticas, de execução de tarefas reais e/ou simuladas.	3.5	3	6.5

*The information in the planning table is for guidance only and does not take into account the heterogeneity of the students.

Metodoloxía docente

	Description
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 e/ou exercícios	(*)Cada semana se dedicará una hora (seminario) a la resolución de problemas y/o ejercicios propuestos 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, así como del material de apoyo 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.).

Atención personalizada	
Methodologies	Description
Prácticas de laboratorio	
Resolución de problemas e/ou exercicios	
Tests	Description
Informes/memorias de prácticas	

Avaluación		Description	Qualification
Resolución de problemas e/ou (*) exercicios		Se valorará la resolución, por parte del alumno, de algunos de los problemas y/o ejercicios propuestos en los boletines, los cuales deben ser entregados al profesor.	15
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 las sesiones de laboratorio.	10
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 revisado y evaluado por el profesor.	10
Probas de resposta curta	(*)	Se realizará una prueba escrita correspondiente a los cuatro primeros temas del programa. Dicha prueba eliminará materia, en caso de ser aprobada. Los alumnos que no la superen tendrán que examinarse de esta parte en la prueba final.	20
Probas de resposta longa, de desenvolvimento	(*)	Se realizará una segunda prueba escrita correspondiente a los cuatro últimos temas del programa. Los alumnos que no hayan superado la primera prueba se examinarán de toda la materia. Dicha prueba se realizará el día del examen final.	30
Probas prácticas, de execução de tarefas reais e/ou simuladas.	(*)	Al final de las sesiones de laboratorio, se realizará una prueba práctica (una sesión de laboratorio) que permitirá evaluar las competencias y destrezas adquiridas por el alumno durante las sesiones de laboratorio.	15

Other comments on the Evaluation

Bibliografía. Fontes 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**, 8^a Ed., Thompson, Madrid,
 D.C. Harris, **Análisis Químico Cuantitativo**, 2^a Ed., Reverté, Barcelona,
 Gary D. Christian, **Química Analítica**, 6^a Ed., McGraw-Hill,

Recomendaciones

Subjects that continue the syllabus

Química analítica II/V11G200V01503

Química analítica III/V11G200V01601

Subjects that are recommended to be taken simultaneously

Física III/V11G200V01301

Química física I/V11G200V01303

Química orgánica I/V11G200V01304

Subjects that it is recommended to have taken before

Química, física e bioloxía: Laboratorio integrado I/V11G200V01103

Química, física e xeoloxía: Laboratorio integrado II/V11G200V01202

Química: Química I/V11G200V01105

Química: Química II/V11G200V01204

IDENTIFYING DATA

Química física I

Subject	Química física I			
Code	V11G200V01303			
Study programme	Grao en Química			
Descriptors	ECTS Credits	Choose	Year	Quadmester
	6	Mandatory	2	1c

Teaching language

Department	Química física
Coordinator	Perez Juste, Ignacio
Lecturers	Perez Juste, Ignacio
E-mail	uviqpipj@uvigo.es
Web	http://http://webs.uvigo.es/qf1_web/

General description (*)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 de titulación

Code

A6	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: principios de Termodinámica e as súas aplicacións en Química
A18	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: principios de Electroquímica
A19	Aplicar os coñecementos e a comprensión á resolución de problemas cuantitativos e cualitativos de natureza básica
A20	Avaliar, interpretar e sintetizar datos e información química
A23	Presentar material e argumentos científicos de xeito oral e escrita a unha audiencia especializada
B1	Comunicarse de forma oral e escrita en polo menos unha das linguas oficiais da Universidade
B3	Aprender de forma autónoma
B4	Procurar e administrar información procedente de distintas fontes
B5	Utilizar as tecnoloxías da información e das comunicacións e manexar ferramentas informáticas básicas
B6	Manexar as matemáticas, incluíndo aspectos tales como análise de erros, estimacións de ordes de magnitude, uso correcto de unidades e modos de presentación de datos
B7	Aplicar os coñecementos teóricos á práctica
B8	Traballar en equipo
B9	Traballar de forma autónoma
B12	Planificar e administrar adecuadamente o tempo
B13	Tomar decisións
B14	Analizar e sintetizar información e obter conclusións
B15	Avaliar de modo crítico e construtivo o entorno e a si mesmo

Competencias de materia

Expected results from this subject

Training and Learning Results

(*)Emplear el concepto de función de estado para calcular las variaciones de las distintas funciones de estado termodinámicas de una sustancia pura.	A6	B1
	A19	B3
	A20	B4
	A23	B5
		B6
		B7
		B8
		B9
		B12
		B13
		B14
		B15

(*)Obtener la entropía de una sustancia a partir de medidas calorimétricas	A6 A19 A20 A23	B1 B3 B4 B5 B6 B7 B8 B9 B12 B13 B14 B15
(*)Establecer si un proceso que sufre una sustancia pura es espontáneo o no a partir del cálculo de las variaciones de las propiedades termodinámicas	A6 A19 A20 A23	B1 B3 B4 B5 B6 B7 B8 B9 B12 B13 B14 B15
(*)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	A6 A19 A20 A23	B1 B3 B4 B5 B6 B7 B8 B9 B12 B13 B14 B15
(*)Calcular la función fugacidad para un gas real a partir de su ecuación de estado o bien a partir de medidas experimentales	A6 A19 A20 A23	B1 B3 B4 B5 B6 B7 B8 B9 B12 B13 B14 B15
(*)Calcular la constante termodinámica de reacciones en disolución, a partir de las concentraciones de las especies o a partir de las funciones termodinámicas	A6 A19 A20 A23	B1 B3 B4 B5 B6 B7 B8 B9 B12 B13 B14 B15

(*)Calcular las características termodinámicas de un cambio de fase, y saber el intervalo de aplicabilidad de las ecuaciones empleadas	A6 A19 A20 A23	B1 B3 B4 B5 B6 B7 B8 B9 B12 B13 B14 B15
(*)Calcular las propiedades termodinámicas de una disolución ideal a partir de su composición	A6 A19 A20 A23	B1 B3 B4 B5 B6 B7 B8 B9 B12 B13 B14 B15
(*)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	A6 A19 A20 A23	B1 B3 B4 B5 B6 B7 B8 B9 B12 B13 B14 B15
(*)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	A6 A18 A19 A20 A23	B1 B3 B4 B5 B6 B7 B8 B9 B12 B13 B14 B15
(*)Emplear medidas experimentales procedentes de las células galvánicas para determinar funciones de estado de reacción	A6 A18 A19 A20 A23	B1 B3 B4 B5 B6 B7 B8 B9 B12 B13 B14 B15

(*)Determinar la actividad y/o el coeficiente de actividad iónico medio de un electrolito mediante medidas experimentales de FEM de células galvánicas	A6 A18 A19 A20 A23	B1 B3 B4 B5 B6
		B7
		B8
		B9
		B12
		B13
		B14
		B15
(*)Analizar la importancia de la interfase y de los distintos fenómenos asociados a ella en los procesos termodinámicos de los sistemas materiales	A6 A19 A20 A23	B1 B3 B4 B5
		B6
		B7
		B8
		B9
		B12
		B13
		B14
		B15
(*)Establecer la importancia de la tensión superficial y los distintos procesos asociados en función de la naturaleza del sistema	A6 A19 A20 A23	B1 B3 B4 B5
		B6
		B7
		B8
		B9
		B12
		B13
		B14
		B15
(*)Diferenciar entre procesos de adsorción física y química y describir los modelos empleados para su descripción	A6 A19 A20 A23	B1 B3 B4 B5
		B6
		B7
		B8
		B9
		B12
		B13
		B14
		B15

Contidos

Topic

(*)Principios de la termodinámica en la química. (*)

Termoquímica.

(*)Funciones termodinámicas (*)

(*)Equilibrio químico entre gases. (*)

Condicóns de equilibrio termodinámico. Grado de avance. Equilibrio en reaccións en fase gasosa.

Constante de equilibrio termodinámica en reaccións en fase gasosa. Influencia da temperatura na constante de equilibrio. Factores que afectan á posición do equilibrio: principio de Le Châtelier.

(*)Equilibrio de fases en sistemas de un compónente.	(*)
Conceptos de compónente, fase e grado de liberdade. Condicións de equilibrio entre fases. Regra das fases. Cambios de fase de primeira orde. Ecuacións de Clapeyron e Clausius-Clapeyron. Cambios de fase de orde superior.	
(*)Disoluciós ideaís.	(*)
Volúmenes molares parciais. Ecuación de Gibbs-Duhem. Disolución ideal: Lei de Raoult. Diagramas P-x y T-x. Disolución diluída ideal: Lei de Henry. Propiedades coligativas.	
(*)Disoluciós no ideaís.	(*)
Desviacións da lei de Raoult. Actividade e coeficiente de actividad. Coeficientes de actividad nas escalas de molalidades e molaridades. Disoluciós de electrolitos. Teoría de Debye-Hückel.	
(*)Equilibrios químicos en disolucións.	(*)
Constante de equilibrio termodinámica en reaccións en disolución. Equilibrios ácido-base. Producto de solubilidade. Efectos salinos. Sistemas electroquímicos. Células galvánicas e electrolíticas. Medida da forza electromotriz dunha 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

	Class hours	Hours outside the classroom	Total hours
Sesión maxistral	27	35	62
Seminarios	13	46	59
Resolución de problemas e/ou exercicios	0	14	14
Probas de autoavaliación	0	10	10
Probas de resposta curta	2	0	2
Probas de resposta longa, de desenvolvemento	3	0	3

*The information in the planning table is for guidance only and does not take into account the heterogeneity of the students.

Metodoloxía docente

	Description
Sesión maxistral	(*)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 do alumno, bajo la supervisión del profesor.

Atención personalizada

Tests	Description
Probas de autoavaliación	
Resolución de problemas e/ou exercicios	

Avaluación

	Description	Qualification
Resolución de problemas e/ou exercicios	(*)Problemas propuestos para cada tema de la asignatura.	Hasta un 15
Probas de autoavaliación	(*)Pruebas tipo test en la plataforma TEMA.	Hasta un 15
Probas de respuesta curta	(*)Pruebas escritas cortas sobre ciertas partes da materia.	Hasta un 20
Probas de respuesta longa, de desenvolvemento	(*)Examen escrito sobre toda la materia de la asignatura.	Mínimo un 65

Other comments on the Evaluation

Bibliografía. Fontes de información

Levine, **Fisicoquímica**, McGraw-Hill. 5^a Ed,
Atkins, **Química Física**, Panamerica, 8^a Ed,
Engel, **Química Física**, Pearson,
Chang, **Fisicoquímica**, McGraw-Hill,

Recomendacóns**Subjects that continue the syllabus**

Química física II/V11G200V01403

Subjects that it is recommended to have taken before

Matemáticas: Matemáticas II/V11G200V01203

Química: Química I/V11G200V01105

Química: Química II/V11G200V01204

IDENTIFYING DATA**Química orgánica I**

Subject	Química orgánica I			
Code	V11G200V01304			
Study programme	Grao en Química			
Descriptors	ECTS Credits 9	Choose Mandatory	Year 2	Quadmester 1c
Teaching language	Galego Inglés			
Department	Química orgánica			
Coordinator	Iglesias Randulfe, Maria Teresa			
Lecturers	Cid Fernandez, Maria Magdalena Fall Diop, Yagamare Gomez Pachos, Maria Generosa Iglesias Antelo, Maria Beatriz Iglesias Randulfe, Maria Teresa			
E-mail	iglesias@uvigo.es			
Web				
General description	Nesta materia preténdese dar ao alumno unha formación sobre os principios fundamentais nos que se basea a Química Orgánica facendo referencia á estrutura e reactividade dos compostos orgánicos. Logo de dous temas xerais comezarase polo estudo detallado da reactividade dos grupos funcionais con enlace múltiple carbono-oxíxeno e carbono-carbono, incluíndo os compostos aromáticos.			

Competencias de titulación

Code

A2	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: tipos de reacción química e as súas principales características asociadas
A10	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: propiedades dos compostos alifáticos, aromáticos, heterocíclicos e organometálicos
A11	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: natureza e comportamento dos grupos funcionais en moléculas orgánicas
A12	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: trazos estruturais dos elementos químicos e os seus compostos, incluíndo a estereoquímica
A13	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: principais rutas de síntese en Química Orgánica, incluíndo as interconversións de grupos funcionais e a formación dos enlaces carbono-carbono e carbono-heteroátomo
A19	Aplicar os coñecementos e a comprensión á resolución de problemas cuantitativos e cualitativos de natureza básica
A20	Avaliar, interpretar e sintetizar datos e información química
A21	Recoñecer e implementar boas prácticas científicas de medida e experimentación
A23	Presentar material e argumentos científicos de xeito oral e escrita a unha audiencia especializada
A25	Manexar con seguridade sustancias químicas, considerando as súas propiedades físicas e químicas, incluíndo a valoración de calquera risco específico asociado co seu uso
A26	Realizar procedementos habituais de laboratorio e utilizar a instrumentación en traballos sintéticos e analíticos
A27	Monitorizar, mediante observación e medida de propiedades físicas e químicas, acontecementos ou cambios e documentalos e rexistralos de xeito sistemático e fiable
A28	Interpretar datos derivados das observacións e medicións do laboratorio en termos do seu significado e relationalos coa teoría adecuada
B1	Comunicarse de forma oral e escrita en polo menos unha das linguas oficiais da Universidade
B3	Aprender de forma autónoma
B4	Procurar e administrar información procedente de distintas fontes
B5	Utilizar as tecnoloxías da información e das comunicacíons e manexar ferramentas informáticas básicas
B7	Aplicar os coñecementos teóricos á práctica
B8	Traballar en equipo
B9	Traballar de forma autónoma
B12	Planificar e administrar adequadamente o tempo
B13	Tomar decisións
B14	Analizar e sintetizar información e obter conclusións
B15	Avaliar de modo crítico e construtivo o entorno e a si mesmo

Competencias de materia

Expected results from this subject

Training and Learning Results

Distinguir as reaccións más habituais en Química Orgánica. Relacionar o perfil enerxético cunha reacción determinada. Diferenciar os tipos de reactivos. Diferenciar os tipos de intermedios de reacción.	A2 A19	B1 B3 B4 B7 B8 B9 B12 B14
Establecer a influencia da estrutura e as características químicas dos grupos funcionais presentes nunha molécula na súa reactividade.	A2 A11	B1 B3 B4 B7 B8 B9 B12 B14
Explicar a reactividade dos compostos carbonílicos mediante un mecanismo de adición nucleófila e dos ácidos carboxílicos e os seus derivados mediante un mecanismo de adición-eliminación	A2 A10 A11 A13	B1 B3 B4 B7 B8 B9 B12 B14
Explicar a reactividade de compostos orgánicos con enlaces múltiples carbono-carbono mediante un mecanismo de adición electrófila.	A2 A10 A11 A13	B1 B3 B4 B7 B8 B9 B12 B14
Explicar a reactividade dos compostos aromáticos a través dun mecanismo de substitución electrófila.	A2 A10 A11 A13	B1 B3 B4 B7 B8 B9 B12 B14
Describir detalladamente para cada transformación o mecanismo de reacción adecuado, indicando etapas de reacción, estados de transición, intermedios etc.	A2 A11	B1 B3 B4 B7 B8 B9 B12 B14
Predicir o resultado da reacción dun substrato concreto cun reactivo dado nunhas condicións determinadas, no concernente á rexioselectividade e estereoselectividade da reacción.	A11 A12 A13 A19	B1 B3 B4 B7 B8 B9 B12 B14
Aplicar as normas de seguridade e hixiene no traballo de laboratorio e levar a cabo o tratamento e a eliminación correcta dos residuos xerados.	A25	B1 B3 B4 B7 B8 B9 B12 B13 B14 B15

Realizar correctamente los procedimientos experimentales habituales en preparaciones orgánicas sencillas.	A21 A26	B1 B3 B4 B7 B8 B9 B12 B13 B14
Levar a cabo la elaboración del producto de una reacción, así como su aislamiento y purificación mediante técnicas habituales (extracción, destilación, recristalización y cromatografía).	A21 A26 A27	B1 B3 B4 B7 B8 B9 B12 B13 B14
Redactar y describir de forma adecuada los experimentos realizados en el cuaderno de laboratorio, de modo que sean reproducibles.	A23 A27 A28	B1 B3 B4 B7 B8 B9 B12 B13 B14 B15
Buscar y seleccionar información sobre los temas estudiados.	A20	B4 B5 B14 B15

Contidos

Topic

Tema 1. Reactividad de los compuestos orgánicos	Tipos de reacciones orgánicas: adición, eliminación, sustitución, condensación, transposición. Isomerización. Mecanismos de reacción: reacciones concertadas y por pasos. Perfil energético de una reacción. Control cinético y control termodinámico. Rotura homolítica e heterolítica: reacciones radicalarias e iónicas. Intermedios de reacción: radicales libres, carbocationes y carbaniones. Concepto de nucleófilo y electrófilo.
Tema 2. Estructura y reactividad de grupos funcionales	Alcanos y cicloalcanos: estabilidad y tensión de anel. Estereoisomería configuracional. Alquenos, alquinos y hidrocarburos aromáticos: reactividad de enlaces múltiples, conjugación, resonancia, aromaticidad, acidez de alquinos. Compuestos orgánicos que contienen heteroátomos: nitrógeno, oxígeno, halógenos, metales, azufre. Acidez y basicidad de aminas y alcoholes. Estructuras de resonancia. Tautomería ceteno.
Tema 3. Reacciones de adición nucleófila a grupos carbonilo	Mecanismo general de la adición nucleofílica. Adiciones nucleofílicas no reversibles: adición de compuestos organometálicos (alquinuros, organolíticos y magnesianos); adición de hidruro (reducción de compuestos carbonílicos a alcoholes); adición de iluros de fósforo (reacción de Wittig). Reacciones de adición reversible: adición de compuestos oxigenados (agua, alcoholes); adición de tioles; adición de compuestos nitrogenados (aminas y otros compuestos nitrogenados); adición de cianuro.
Tema 4. Reacciones de sustitución nucleófila sobre grupos carbonilo	Mecanismo general de adición-eliminación. Características estructurales y reactividad relativa de los derivados de ácido. Reacciones de hidrólisis. Reacciones de esterificación y transesterificación. Reacciones de amonólisis. Hidrólisis de nitrilos
Tema 5. Reacciones de adición a enlaces múltiples C-C	Hidroxenación (calores de hidroxenación y estabilidad de alquenos y dienos). Reacciones de adición electrófila a alquenos: adición de HX, estructura y estabilidad de carbocationes, regioselectividad; reacciones de hidratación, orientación y estereoquímica; adición de X ₂ ; reacciones de hidroxilación. Reacciones de adición a alquinos. Reacciones de adición electrófila a dienos conjugados. Reacciones de oxidación.

Tema 6. Reaccións de substitución electrófila aromática	Mecanismo xeral da substitución electrófila aromática. Reaccións principais de substitución electrófila aromática: haloxenación, nitración, sulfonación, alquilación e acilación de Friedel-Crafts. Reaccións de substitución electrófila aromática en fenois e aminas aromáticas. Reaccións de substitución electrófila aromática en sistemas aromáticos substituídos: orientación e reactividade.
Práctica 1	Revisión das normas de seguridade no laboratorio de Química Orgánica. Recoñecemento e manexo do material de laboratorio.
Práctica 2	Reducción dunha cetona
Práctica 3	Adición nucleófila ao grupo carbonilo. Reacción de Wittig.
Práctica 4	Esterificación- transesterificación. Preparación dun produto natural: salicilato de metilo (axente aromatizante)
Práctica 5	Extracción dun éster natural (trimiristina) e hidrólise básica do mesmo
Práctica 6	Síntese por pasos: preparación da benzocaína a partir da para-toluidina.
Práctica 7	Adición electrófila a un dobre enlace carbono-carbono
Práctica 8	Substitución electrófila aromática: alquilación de Friedel-Crafts e nitración aromática

Planificación

	Class hours	Hours outside the classroom	Total hours
Sesión maxistral	14	41	55
Resolución de problemas e/ou exercicios	26	49	75
Traballos tutelados	3	17	20
Prácticas de laboratorio	45	5	50
Probas de resposta curta	2	6	8
Probas de resposta longa, de desenvolvemento	3	8	11
Probas prácticas, de ejecución de tarefas reais e/ou simuladas.	4	2	6

*The information in the planning table is for guidance only and does not take into account the heterogeneity of the students.

Metodoloxía docente

	Description
Sesión maxistral	Exposición por parte do profesor dos aspectos xerais do programa de forma estruturada, facendo especial énfase nos fundamentos e aspectos más importantes ou de difícil comprensión para o alumno. O profesor facilitará , a través da plataforma tem@, o material necesario para a realización do traballo da semana seguinte. O alumno deberá traballar previamente o material entregado polo profesor e consultar a bibliografía recomendada para completar a información, co fin de seguir as explicacións dos contidos do programa con maior aproveitamento. Ao remate de cada tema o alumno deberá entregar cuberto un cuestionario con preguntas relativas ao mesmo
Resolución de problemas e/ou exercicios	Cada semana dedicaránse dúas horas a discutir os aspectos más complicados do tema tratado, a resolver cuestións xurdidas no desenvolvemento dos temas e a resolución por parte do alumnado dos exercicios propostos nos boletíns
Traballos tutelados	O estudiante, de maneira individual ou en grupo, elabora un documento sobre a temática da materia ou prepara seminarios, investigacións, memorias, ensaios, resumos de lecturas, conferencias, etc. Xeralmente trátase dunha actividade autónoma do/s estudiante/s que inclúe a procura e recollida de información, lectura e manexo de bibliografía, redacción...
Prácticas de laboratorio	Realizaranse experimentos de laboratorio de xeito individual, en sesións de 3,5 h. cada unha. O alumno disporá dos guíños das prácticas así como de material de apoio na plataforma tem@ co fin de que poida ter coñecemento previo dos experimentos a realizar. Ao inicio de cada sesión o profesor fará unha exposición dos contidos a desenvolver polos alumnos. Durante a realización das prácticas o alumno elaborará un caderno de laboratorio no que deberá anotar todas as observacións relativas ao experimento realizado

Atención personalizada

Methodologies	Description
Resolución de problemas e/ou exercicios	Tempo dedicado polo profesorado a atender as necesidades e consultas do alumnado relacionadas co estudo e/ou temas vinculados coa materia e coas actividades desenvolvidas. O profesorado informará sobre o horario disponible na presentación da materia
Traballos tutelados	Tempo dedicado polo profesorado a atender as necesidades e consultas do alumnado relacionadas co estudo e/ou temas vinculados coa materia e coas actividades desenvolvidas. O profesorado informará sobre o horario disponible na presentación da materia

Avaliación

	Description	Qualification
Resolución de problemas e/ou exercicios	Valorarase a asistencia e participación nas clases de aula, a resolución por parte do alumno dunha serie de problemas e/ou exercicios propostos nun tempo/condicións establecidas polo profesor así como a realización de traballos sobre temas concretos propostos polo profesor. A cualificación neste apartado só será considerada se o estudiante participa alomenos na metade destas actividades e acada alomenos o 50% da puntuación máxima para este apartado	15
Traballos tutelados	Valoración do resultado obtido na elaboración dun documento ou presentación sobre a temática da materia, na preparación de seminarios, investigacións, memorias, ensaios, resumos de lecturas, conferencias, etc. A participación neste apartado será obligatoria e a cualificación só será considerada se o estudiante acada alomenos o 50% da puntuación máxima para este apartado	10
Prácticas de laboratorio	A asistencia ás clases prácticas é obligatoria O alumno para superar a materia deberá acadar alomenos o 50% da puntuación máxima posible para este apartado. Valorarase o seguinte: <ul style="list-style-type: none">- Seguimiento do traballo experimental realizado polo alumno nas sesións de laboratorio (12%)- Proba práctica (na que tamén figurarán cuestións teóricas sobre a práctica realizada no exame) que permitirá avaliar as competencias e destrezas adquiridas polo alumno. Dita proba realizarase de xeito independiente para cada grupo de prácticas e terá lugar ao remate das sesións de laboratorio (12%).- Elaboración honesta, clara e precisa do caderno de laboratorio (6%)	30
Probas de resposta curta	Realizaranse dúas probas breves, unha ao rematar o tema 2 e outra o tema 4, que abarcarán o temario explicado	20
Probas de resposta longa, de desenvolvemento	Unha proba global para a avaliação das competencias adquiridas na materia, realizarase tras a impartición da mesma. Para a superación da materia o alumno deberá acadar un mínimo dun 50% na totalidade das probas escritas (probas de resposta curta e probas de resposta longa). A cualificación final será a suma de todos os apartados sempre que se superen os mínimos esixidos. De non ser o caso, a cualificación que figurará na acta será a da proba global de fin de cuatrimestre ponderada	25

Other comments on the Evaluation

A participación do estudiante nalgún dos actos de avaliação da materia implicará a condición de **presentado/a** e, polo tanto, a asignación dunha cualificación. Considéranse actos de avaliação a asistencia ás clases prácticas de laboratorio (tres ou máis), a realización de probas, a realización dos traballos tutelados e a entrega dun mínimo do 25% dos traballos ou exercicios encargados polo profesor.

Avaliación da convocatoria de xullo

Os alumnos que non superen a materia na convocatoria de fin de cuatrimestre só poderán recuperar os seguintes apartados na convocatoria de xullo:

a) Resolución de problemas e/ou exercicios (máx. 1,5 puntos): Unha vez rematado o proceso de avaliação de fin de cuatrimestre, o profesorado proporá aos alumnos que non superen a materia a realización de boletíns de exercicios que lles permitan acadar as competencias das que serán avaliados na convocatoria de xullo. Este traballo terá que ser entregado antes do exame oficial desta convocatoria.

Esta cualificación substituirá á acadada durante o período lectivo neste apartado.

b) Probas escritas (de resposta curta e longa) (máximo 4,5 puntos): Os alumnos farán unha proba escrita na que se avaliarán as competencias adquiridas na materia. Para superar a materia o alumno deberá acadar alomenos o 50% da puntuación máxima para este apartado.

Esta cualificación substituirá a acadada no conxunto das probas escritas durante o período lectivo.

O resto das cualificacións (prácticas de laboratorio e traballos tutelados) serán os obtidos na avaliação de fin de cuatrimestre.

A cualificación final será a suma de todos os apartados sempre que se superen os mínimos esixidos. De non ser o caso, a cualificación que figurará na acta será a da proba escrita ponderada.

Bibliografía. Fontes de información

VOLLHARDT, K.P.C. e SCHORE, N.E. [Química Orgánica](#), 5ª edición en castelán,
WADE, L.G., Jr, [Química Orgánica](#), 7ª edición en castelán,
YURKANIS BRUICE, P, [Química Orgánica](#), 5ª edición en castelán,

Bibliografía complementaria

- EGE, S. "Organic Chemistry: Structure and reactivity", 5ª edición, Houghton Mifflin Company, Boston (2004)
- CAREY, F. "Química Orgánica", 6ª edición en castelán, McGraw-Hill Interamericana, 2006.
- CLAYDEN, J. GREEVES, N. WARREN, S. e WOTHERS, P. "Organic Chemistry", Oxford University Press, 2001.
- PALLEROS, D.R. "Experimental Organic Chemistry", John Wiley and Sons, 2000.
- QUIÑOÁ, E. e RIGUERA, R. "Cuestiones y ejercicios de Química Orgánica", 2ª edición, McGraw-Hill Interamericana, Madrid (2004).
- QUIÑOÁ, E. e RIGUERA, R. "Nomenclatura y representación de los compuestos orgánicos", 2ª edición, McGraw-Hill Interamericana, Madrid (2005).

Recomendacións

Subjects that are recommended to be taken simultaneously

Física III/V11G200V01301
Química analítica I/V11G200V01302
Química física I/V11G200V01303

Subjects that it is recommended to have taken before

Bioloxía: Bioloxía/V11G200V01101
Química, física e bioloxía: Laboratorio integrado I/V11G200V01103
Química, física e xeoloxía: Laboratorio integrado II/V11G200V01202
Química: Química I/V11G200V01105
Química: Química II/V11G200V01204

Other comments

Materias que continúan o temario:

Química Orgánica II e Química Orgánica III

IDENTIFYING DATA**(*)Ferramentas informáticas e de comunicación en química**

Subject	(*)Ferramentas informáticas e de comunicación en química			
Code	V11G200V01401			
Study programme	(*)Grao en Química			
Descriptors	ECTS Credits	Choose	Year	Quadmester
	6	Mandatory	2nd	2nd
Teaching language	English			
Department				
Coordinator	Pérez Lorenzo, Moisés			
Lecturers	Pérez Lorenzo, Moisés Vaz Araújo, Belén			
E-mail	moisespl@uvigo.es			
Web				
General description	The course aims to familiarize students with the use of chemical information sources (scientifical and technical in general) with emphasis on its use through the Internet, as well as with the use of all types of software tools for statistical calculations and chemical modeling . Attention is also paid to the acquisition of important communication skills (writing scientific and technical documents, academic, web design, etc).			

Competencies

Code
A20 (*)Avaliar, interpretar e sintetizar datos e información química
A29 (*)Demostrar habilidades para os cálculos numéricos e a interpretación dos datos experimentais, con especial énfase na precisión e a exactitude
B2 (*)Comunicarse a nivel básico en inglés no ámbito da Química
B4 (*)Procurar e administrar información procedente de distintas fontes
B5 (*)Utilizar as tecnoloxías da información e das comunicáis e manexar ferramentas informáticas básicas
B6 (*)Manexar as matemáticas, incluíndo aspectos tales como análise de erros, estimacións de ordes de magnitud, uso correcto de unidades e modos de presentación de datos
B7 (*)Aplicar os coñecementos teóricos á práctica
B9 (*)Traballar de forma autónoma
B10 (*) Traballar nun contexto tanto nacional como internacional
B14 (*) Analizar e sintetizar información e obter conclusións
B15 (*)Avaliar de modo crítico e construtivo o entorno e a si mesmo

Learning aims

Expected results from this subject	Training and Learning Results	
To know the different sources of scientific and technical information	A20	B2 B4 B5 B9 B14
To understand the basics of running a Science library and know how to perform an advanced use of its services		B2 B4 B5 B9 B14
To classify scientific journals based on their theme or objective	A20	B2 B5 B9 B10 B15
To know the basic characteristics of other sources: technical reports, conference proceedings, patents, dissertations, government publications, standards, videos, dictionaries, encyclopedias, directories, databases and "handbooks".	A20	B2 B5 B10
To know the basic characteristics of other sources: technical reports, conference proceedings, patents, dissertations, government publications, standards, videos, dictionaries, encyclopedias, directories, databases and "handbooks".	A20	B2 B5 B10

To know the structure and function of an abstracting or indexing service	A20	B2 B5 B10
To know how to use statistical program packages to perform data fitting, graphical and other kinds of statistical analysis	A29	B5 B6 B7 B9 B14

Contents

Topic

The scientific literature: general aspects.	Structure and classification of the literature. General rules of a literature search. Function, organization and use of a scientific library.
Information Sources	Books. Journals. Technical reports. Conference Proceedings. Patents. Thesis. Government Publications. Standards. Videos. Dictionaries. Directories Encyclopedias Databases
Using Internet	Basic Internet services. Remote connection and file transfer utilities. Search engines. Electronic lists and subscription services. Other services. Structure, function and design of web pages.
Indexing and abstracting services	Identification of a scientific paper. The ISI Web of Knowledge (WOK). The Chemical Abstract Service (CAS) and the Scifinder. Other abstracting services.
Bibliographic Managers	Handbooks. Classification of bibliographic references: general principles. 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. General aspects of the scientific style and the use of English. How to write: CVs, progress reports, grant requests and other academic documents.

Using Statistical Sofware

2 and 3D graphics.

Statistical Analysis.

Data fitting.

Planning

	Class hours	Hours outside the classroom	Total hours
(*)Sesión maxistral	14	28	42
(*)Prácticas en aulas de informática	26	52	78
(*) Resolución de problemas e/ou exercicios	2	22	24
(*)Probas de resposta longa, de desenvolvimento	1.5	4.5	6

*The information in the planning table is for guidance only and does not take into account the heterogeneity of the students.

Methodologies

	Description
(*)Sesión maxistral	The theoretical aspects of the subject are presented
(*)Prácticas en aulas de informática	Computer lab exercises: literature searches, use of bibliographic managers, use of statistical packages, report writing.
(*) Resolución de problemas e/ou exercicios	Report or article writing in English language. Simple exercises with modelling software

Personalized attention

Methodologies	Description
(*)Prácticas en aulas de informática	The student is helped by providing adequate guidelines. Since all lectures are given in the computer room, the student will be helped mostly there in a practical and effective way.
Resolución de problemas e/ou exercicios	The student is helped by providing adequate guidelines. Since all lectures are given in the computer room, the student will be helped mostly there in a practical and effective way.

Assessment

	Description	Qualification
(*)Prácticas en aulas de informática	Typically, literature searches	20
(*) Resolución de problemas e/ou exercicios	Typically, database searches and use of utilities of modelling software.	40
(*)Probas de respuesta longa, de desenvolvimento	Written exam consisting of short questions.	40

Other comments on the Evaluation

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

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

Sources of information

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

Kaplan, S.M., **The English-Spanish Spanish-English dictionary of chemistry**, 1st,

Maizell, R.E., **How to find chemical information: a guide for practising chemists, educators and students**, 3d,

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

References 1,2 and 4, are considered "basic". A list "topic dependent" references (including other web resources and software) will be handed to the student in due course.

Recommendations

Subjects that are recommended to be taken simultaneously

(*)Química física II/V11G200V01403

Subjects that it is recommended to have taken before

(*)Física III/V11G200V01301

(*)Química física I/V11G200V01303

IDENTIFYING DATA

Métodos numéricos en química

Subject	Métodos numéricos en química			
Code	V11G200V01402			
Study programme	Grao en Química			
Descriptors	ECTS Credits	Choose	Year	Quadmester
	6	Mandatory	2	2c
Teaching language				
Department	Matemáticas Química analítica e alimentaria Química física			
Coordinator	Besada Morais, Manuel			
Lecturers	Besada Morais, Manuel Estevez Valcarcel, Carlos Manuel Leao Martins, Jose Manuel			
E-mail	mbesada@uvigo.es			
Web				
General description	Esta materia é a versión práctica matemática de aplicación a datos observados e de solución numérica de numerosos problemas que teñen difícil, ou imposible, solución analítica. Permitirá ó alumno adquirir habilidades sobre o manexo de gran cantidad de información numérica e consolidar o manexo dunha calculadora científica de gran potencia.			

Competencias de titulación

Code			
A22	Procesar datos e realizar cálculo computacional relativo a información e datos químicos		
A23	Presentar material e argumentos científicos de xeito oral e escrita a unha audiencia especializada		
A29	Demostrar habilidades para os cálculos numéricos e a interpretación dos datos experimentais, con especial énfase na precisión e a exactitude		
B1	Comunicarse de forma oral e escrita en polo menos unha das linguas oficiais da Universidade		
B3	Aprender de forma autónoma		
B4	Procurar e administrar información procedente de distintas fontes		
B5	Utilizar as tecnoloxías da información e das comunicacóns e manexar ferramentas informáticas básicas		
B6	Manexar as matemáticas, incluíndo aspectos tales como análise de errores, estimacións de ordes de magnitud, uso correcto de unidades e modos de presentación de datos		
B7	Aplicar os coñecementos teóricos á práctica		
B8	Traballar en equipo		
B9	Traballar de forma autónoma		
B12	Planificar e administrar adecuadamente o tempo		
B13	Tomar decisións		
B14	Analizar e sintetizar información e obter conclusións		
B15	Avaliar de modo crítico e construtivo o entorno e a si mesmo		

Competencias de materia

Expected results from this subject	Training and Learning Results		
Utilizar os paquetes numéricos e simbólicos de MATLAB.	A22	B5	B9
Controlar distintas bases de numeración e decatarse da existencia de errores cometidos nas aproximacións	A29	B6	B9
Buscar aproximacións de raíces de ecuacións dunha variable e sistemas de ecuacións.	A22	B5	
	A29	B6	
		B7	
Utilizar polinomios que se axustan a varios puntos do plano.	A22	B5	
	A29	B6	
		B7	
Derivar e integrar numericamente, relacionar estes conceptos numéricos e analíticos e entender o porque da súa necesidade.	A22	B5	
	A29	B6	
		B7	

Manexar axustes de datos a distintos tipos de curvas de elección previa mediante paquetes informáticos.	A22 A29	B4 B5 B6 B14
Entender e resolver unha ecuación diferencial e a necesidade dos métodos numéricos.	A22 A29	B3 B5 B6 B7
Expresar con soltura, de forma oral e escrita, conceptos numéricos.	A23	B1 B3 B4 B5 B8 B12 B13 B14 B15

Contidos

Topic

Tema 1. Introducción a análisis numérico.	Sistemas de numeración. Necesidad dos métodos numéricos. Fontes e análise do error. Software disponible.
Tema 2. Aproximación de raíces de ecuaciones dunha variable.	Condicionamiento do cálculo de raíces. Métodos de separación de raíces. Método da bisección. Método de Newton-Raphson. Teorema do punto fijo.
Tema 3. Interpolación numérica.	O problema xeral de interpolación. Interpolación de Lagrange. Error de interpolación e elección óptima de nodos. Interpolación polinomial.
Tema 4. Axuste de curvas.	Axuste de datos. Rectas de regresión por mínimos cadrados. Aproximación de funcións por mínimos cadrados. Interpolación polinomial a trozos.
Tema 5. Derivación e integración numérica.	Esquemas de derivación numérica basados en interpolación. Fórmulas de derivación finitas. Error de derivación. Fórmulas de integración con interpolación polinómica. Error de integración. Fórmulas de cuadraturas.
Tema 6. Resolución numérica de sistemas de ecuaciones.	Métodos directos de resolución de sistemas lineais: Gauss. Métodos iterativos clásicos. Métodos de descenso: Máximo descendente e gradiente conjugado. Resolución de sistemas non lineais.

Planificación

	Class hours	Hours outside the classroom	Total hours
Sesión magistral	14	28	42
Prácticas en aulas de informática	26	52	78
Probas de tipo test	4	12	16
Resolución de problemas e/ou exercicios	2	8	10
Traballos e proxectos	0	4	4

*The information in the planning table is for guidance only and does not take into account the heterogeneity of the students.

Metodoloxía docente

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

Atención personalizada

Methodologies	Description
Prácticas en aulas de informática	Cada estudiante demandará ó profesorado as aclaracións que estime oportunas para mellorar a comprensión da materia e desenvolver con éxito as tarefas que lle foron propostas. Estas consultas atenderanse no horario de tutorías ou mediante petición previa.

Avaliación

	Description	Qualification
Prácticas en aulas de informática	Ó final das sesións nas aulas de informática, o alumno resolverá algunos exercicios do mesmo tipo que os dos realizados na aula.	25

Probas de tipo test	Durante o curso realizaranse alomenos tres probas parciais curtas tipo test e tipo práctico que contarán un 25 por cen na cualificación final. Ademais, nunha proba final, realizarase outra proba tipo test de tódala materia que contabilizará outro 10 por cen na cualificación final.	35
Resolución de problemas e/ou exercicios	Ó finalizar o curso realizaráse unha proba práctica resolvendo algúns exercicios prácticos na aula de informática	30
Traballos e proxectos	Participacion en todas as actividades propostas polo profesorado, sexan estas para realizar dentro ou fóra da aula.	10

Other comments on the Evaluation

Os alumnos que non superen a materia na convocatoria ordinaria e pretendan facelo na convocatoria extraordinaria, manterán as cualificacións obtidas durante o curso en cada un dos apartados anteriores, salvo as cualificacións das probas prácticas de informática e as dúas probas realizadas a final de curso que serán avaliadas no exame correspondente. Neste caso, o alumno ten que poñerse en contacto co profesor con suficiente antelación.

A participación do estudiante nalgún dos actos de evaluación da materia implicará a condición de **presentado** e, polo tanto, a asignación dunha cualificación. Considéranse actos de evaluación a asistencia ás prácticas de informática (tres ou mais), a realización de probas ou a entrega dun mínimo do 25% dos problemas ou exercicios encargados polo profesor.

Bibliografía. Fontes de información

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

Recomendacións

Subjects that it is recommended to have taken before

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

IDENTIFYING DATA**Química física II**

Subject	Química física II			
Code	V11G200V01403			
Study programme	Grao en Química			
Descriptors	ECTS Credits	Choose	Year	Quadmester
	9	Mandatory	2	2c
Teaching language	Castelán Galego			
Department	Química física			
Coordinator	Fernandez Novoa, Alejandro			
Lecturers	Estevez Valcarcel, Carlos Manuel Fernandez Novoa, Alejandro			
E-mail	afnovoa@uvigo.es			
Web				
General description	Aplicación dos principios e métodos da Mecánica Cuántica ao estudo da estrutura molecular e a espectroscopia.			

Competencias de titulación

Code	
A3	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: principios da Mecánica Cuántica e a súa aplicación na descripción da estrutura e as propiedades de átomos e moléculas
A6	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: principios de Termodinámica e as súas aplicacións en Química
A8	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: principais técnicas de investigación estrutural, incluíndo a Espectroscopía
A19	Aplicar os coñecementos e a comprensión á resolución de problemas cuantitativos e cualitativos de natureza básica
A20	Avaliar, interpretar e sintetizar datos e información química
A21	Recoñecer e implementar boas prácticas científicas de medida e experimentación
A22	Procesar datos e realizar cálculo computacional relativo a información e datos químicos
A27	Monitorizar, mediante observación e medida de propiedades físicas e químicas, acontecementos ou cambios e documentalos e rexistralos de xeito sistemático e fiable
A28	Interpretar datos derivados das observacións e medicións do laboratorio en termos do seu significado e relationalos coa teoría adecuada
A29	Demostrar habilidades para os cálculos numéricos e a interpretación dos datos experimentais, con especial énfase na precisión e a exactitude

Competencias de materia

Expected results from this subject	Training and Learning Results
Formular hamiltonianos moleculares, utilizar sobre ellos la aproximación de Born-Oppenheimer y discutir sus consecuencias.	A3 A19
Manejar superficies y perfiles de energía potencial y los conceptos relativos a ellas.	A3
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.	A19
Describir las técnicas de localización orbital y el fundamento de la hibridación de orbitales atómicos.	A3
Aplicar (conociendo fundamentos y limitaciones) los principales métodos de cálculo para el estudio de estructuras moleculares (HF, post-HF, DFT, ...).	A3 A19 A20 A22
Describir las formas de interacción radiación-materia y formular reglas de selección de dipolo eléctrico.	A8
Vincular la frecuencia de la radiación con el movimiento molecular responsable de una transición espectroscópica.	A8
Justificar el ensanchamiento de las líneas espectrales y el efecto del medio sobre los espectros.	A8
Interpretar espectros de rotación y vibración-rotación para obtener información estructural, haciendo uso de los modelos cuánticos simples (rotor rígido y elástico y osciladores armónico y anarmónico), reglas de selección y técnicas de asignación de líneas.	A3 A8 A19 A20 A22
Discutir el principio de Franck-Condon y sus consecuencias.	A3 A8

Interpretar espectros electrónicos, determinando información estructural a partir de ellos, y conocer sus fundamentos.	A3 A8 A19 A22
Describir los diferentes procesos de desactivación de estados electrónicos excitados.	A8 A19
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.	A8 A19 A22
Describir las peculiaridades instrumentales de las técnicas espectroscópicas en las diferentes regiones espectrales.	A8
Aplicar los conocimientos teóricos adquiridos en Química Física I para determinar experimentalmente constantes de equilibrio químico, coeficientes de actividad y magnitudes termoquímicas.	A6 A19 A20 A21 A27 A28 A29

Contidos

Topic

Estructura Electrónica das Moléculas Diatómicas.	- Aproximación de Born-Oppenheimer. - Método OM para a molécula H ₂ +. - Métodos OM e EV para a molécula H ₂ . - Método OM para moléculas diatómicas homo e heteronucleares.
Estructura Electrónica das Moléculas Poliatómicas.	- Método OM en moléculas poliatómicas. - Método de Hartree-Fock. Conxuntos base. - Outros métodos en Química Computacional.
Introducción á Espectroscopia Molecular.	- Interacción radiación-materia. Plantexamento xeral. - Integral momento dipolar de transición. Regras de selección. - Intensidade e forma das transicións espetrais.
Espectroscopia de Rotación.	- Espectros de rotación de moléculas diatómicas. Modelos do rotor ríxido e elástico. - Espectros de rotación de moléculas poliatómicas.
Espectroscopia de Vibración.	- Espectros de vibración de moléculas diatómicas. Modelos do oscilador harmónico e anharmónico. - Espectros de vibración-rotación de moléculas diatómicas. - Espectros de vibración de moléculas poliatómicas. - Espectroscopia Raman.
Espectroscopia Electrónica.	- Espectros electrónicos de moléculas diatómicas. - Estructura de vibración. Principio de Franck-Condon. - Estructura fina de rotación. - Espectros electrónicos de moléculas poliatómicas.
Espectroscopias de Resonancia.	- Introducción á resonancia magnética. - Desprazamento químico. - Interacción spin-spin. Constante de acoplamento. - Espectroscopia de resonancia de spin electrónico.
Prácticas de Termodinámica Química (seis sesiones)	- Determinación de constantes de equilibrio empregando técnicas espectrofotométricas ou potenciométricas. - Determinación experimental de entalpías de combustión, disolución, neutralización ou vaporización. - Propiedades coligativas. - Determinación experimental de coeficientes de actividad empregando unha técnica potenciométrica.
Prácticas de Química Cuántica e Espectroscopia (sete sesions).	- Estudio teórico da estructura molecular das moléculas H ₂ y H ₂ +. - Estudio teórico da estructura molecular de outras moléculas diatómicas. - Isomería conformacional e rotación interna no n-butano. - Predicción, interpretación teórica e resolución do espectro de vibración-rotación do HCl en fase gas. - Espectroscopia electrónica: Espectro da molécula de I ₂ en fase gas.

Planificación

	Class hours	Hours outside the classroom	Total hours
Sesión maxistral	27	54	81
Seminarios	13	37	50
Prácticas de laboratorio	45.5	4.5	50

Resolución de problemas e/ou exercicios de forma autónoma	0	10	10
Probas de resposta longa, de desenvolvimento	4	8	12
Informes/memorias de prácticas	0	9	9
Probas de respuesta curta	2	4	6
Probas de tipo test	0	4	4
Probas prácticas, de ejecución de tarefas reais e/ou simuladas.	1	2	3

*The information in the planning table is for guidance only and does not take into account the heterogeneity of the students.

Metodoloxía docente

	Description
Sesión maxistral	Consistirán na exposición dos aspectos fundamentais de cada tema por parte do profesor, tomando como base o material disponible na plataforma TEM@ (esquemas, boletins de problemas,...). Aparte da exposición de temas, tamén se plantearán problemas numéricos que axuden a comprender e asentar os conceptos.
Seminarios	As clases de seminario serán principalmente labor do alumno, baixo a supervisión do profesor, e empregaránse fundamentalmente para: <ul style="list-style-type: none"> - Resolución de problemas, tanto de xeito individual como en grupo. - Incidir, unha vez o alumno traballe os aspectos básicos, sobre aqueles contidos de cada tema que poidan presentar unha maior complexidade. - Propoñer problemas/traballos para a súa resolución na casa, tanto de forma individual como en grupo.
Prácticas de laboratorio	Realización baixo a supervisión do profesor pero de xeito autónomo, de prácticas de laboratorio ou de química computacional. As devanditas prácticas realizaranse por parellas e en sesións de 3,5 horas. Coa antelación suficiente, os alumnos disporán na plataforma TEM@ dos guións das prácticas a realizar xunto con todo o material adicional necesario. O guión presentará os elementos esenciais para realizar a práctica a nivel experimental ou computacional, así como os puntos básicos do seu fundamento teórico e do tratamento dos datos Ó rematar as prácticas, e dentro do prazo que fixe o profesor, será necesario entregar o correspondente informe/memoria.
Resolución de problemas e/ou exercicios de forma autónoma	Para cada un dos temas, proporánse determinados "Problemas Avaliables" ou outros traballos que o alumno deberá resolver ou realizar para entregar ao profesor no prazo que se fixe.

Atención personalizada

Avaliación

	Description	Qualification
Prácticas de laboratorio	Puntúanse aquí xunto co esforzo e a actitude, as destrezas e as competencias desenvolvidas polo alumno durante a realización das distintas prácticas. Este apartado supora como máximo 4,0 puntos da cualificación final máxima da parte experimental que será de 10 puntos.	ata 12,0
Resolución de problemas e/ou exercicios de forma autónoma	Para cada un dos temas, proporánse determinados "Problemas Avaliables" ou otros traballos que o alumno deberá resolver ou realizar. Estos problemas ou traballos no seu conxunto, suporán como máximo 1 punto da cualificación total final máxima da parte teórica que será de 10 puntos.	ata 7,0
Probas de resposta longa, de desenvolvimento	Realización dunha proba escrita global (3 horas de duración) ao final do cuatrimestre, na data fixada pola Xunta de Facultade, que suporá como máximo 6,0 puntos da cualificación total final máxima da parte teórica que será de 10 puntos. Para superar a materia é necesario acadar neste exame unha cualificación mínima de 4,0 puntos sobre 10 puntos. No caso de non superar dita puntuación a cualificación que se reflectirá na acta será únicamente a cualificación deste exame, non contabilizándose ningún dos demais apartados.	ata 42
Informes/memorias de prácticas	Teranse en conta os aspectos formais relativos á organización, uso correcto das unidades, confección correcta das gráficas e exposición dos resultados. Valorarase tamén a análise crítica destes e a obtención de conclusións. Este apartado supora como máximo 2,0 puntos da cualificación final máxima da parte experimental que será de 10 puntos.	ata 6,0

Probas de respuesta curta	Realización ao longo do cuadrimestre de dúas probas cortas (1 hora de duración) de carácter non liberatorio.	ata 14
	Cada unha destas probas suporá como máximo 1 punto da cualificación total final máxima da parte teórica que será de 10 puntos.	
Probas de tipo test	Ó rematar cada tema o grupo de temas o alumno terá, a través de plataforma TEM@, a posibilidade de respostar un "test de autoavaliación" autocorrixible.	ata 7,0
	Estos test no seu conxunto, suporán como máximo 1 punto da cualificación total final máxima da parte teórica que será de 10 puntos.	
Probas prácticas, de execución de tarefas reais e/ou simuladas.	Esta proba escrita realizarase na data fixada pola Xunta de Facultade e versará sobre os coñecementos e destrezas que o alumno debe ter adquirido durante o desenvolvemento das sesións de prácticas. As preguntas situaranse, nalgúns casos, no contexto dalgunhas das experiencias realizadas polo alumno e, noutros, terán un ámbito más xeral. A través das devanditas preguntas avaliarase a súa capacidade para resolver os problemas presentados.	ata 12,0
	Este apartado supora como máximo 4,0 puntos da cualificación final máxima da parte experimental que será de 10 puntos.	

Other comments on the Evaluation

A evaluación do curso realizarase fundamentalmente dun xeito continuado tendo en conta os aspectos mencionados mais arriba, e distinguindo entre a parte teórica e a parte práctica da asignatura.

Parte Teórica:

A evaluación da **parte teórica** contribuirá, no seu conxunto (probas cortas (20%), proba longa (60%), resolución de problemas/traballos (10%), test de autoavaliación (10%)), un **70%** á cualificación final da materia. E **requisito imprescindible para superar a materia** obter na **proba longa** unha **cualificación mínima de 4,0 sobre 10,0 puntos**. No caso de non acadar dita puntuación a cualificación que se reflectirá na acta será únicamente a cualificación deste exame, non contabilizándose ningún dos demais apartados.

Parte Práctica:

A evaluación da **parte práctica** contribuirá, no seu conxunto (prácticas de laboratorio (40%), informes (20%) e examen (40%)), un **30%** á cualificación final da materia. E **requisito imprescindible para superar a materia** obter, na **parte práctica**, unha **cualificación mínima de 5,0 sobre 10 puntos**. No caso de non acadar dita puntuación a cualificación que se reflectirá na acta será únicamente a do 75% desta parte práctica (no caso de terse superada a cualificación mínima de 4,0 puntos na proba longa).

A asistencia ás sesións prácticas é obligatoria e, polo tanto, non é posible aprobar a materia no caso de non terse realizado.

A realización **das duas** probas cortas, ou da proba escrita de prácticas, ou da proba global ou a realización das prácticas de laboratorio, implicará a condición de **presentado/a** e, polo tanto, a asignación dunha cualificación.

Segunda Oportunidade:

Para a evaluación na segunda oportunidade, manteranse as cualificacións e as porcentaxes das probas cortas, dos problemas/traballos propostos, das prácticas de laboratorio e dos test de autoavaliación. No caso de ter unha cualificación igual ou superior a 5,0 puntos na proba global (longa) ou igual ou superior a 4,0 na proba escrita de prácticas, manterase dita cualificación (e a porcentaxe) e só será necesario realizar a outra.

Se o profesor o estima oportuno, tamén poderá ser necesaria a repetición do informe/memoria das prácticas.

Bibliografía. Fontes de información

LEVINE, I. N., **"Fisicoquímica"** (vol. II), 5^a edición,
 ENGEL, T.; REID, P., **"Química Física"**, 1^a edición,
 BERTRÁN, J.; BRACHANDELL, V.; MORENO, M.; SODUPE, M., **"Química Cuántica"**, 2^a edición,
 BERTRÁN RUSCA, J.; NÚÑEZ DELGADO, J., **"Química Física"** (vol. I), 1^a edición,

□ ATKINS P. W., DE PAULA J., **"Química Física"** (8^a Edición). Editorial Médica Panamericana. (2008).

□ LEVINE I.N., **"Química Cuántica"** (5^a ed.), Editorial Prencice Hall (2001).

- BANWELL C.N., MC CASH E., "Fundamentals of Molecular Spectroscopy", Editorial McGraw-Hill (1994).
- LABOWITZ L.C., ARENTS J.S., "Fisicoquímica: Problemas y Soluciones", Editorial AC (1974).
- FORESMAN J.B., FRISH A., "Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods: a guide to using Gaussian" (2^a ed.), Gaussian Inc (1996).

Recomendaciones

Subjects that are recommended to be taken simultaneously

Ferramentas informáticas e de comunicación en química/V11G200V01401
Métodos numéricos en química/V11G200V01402
Química inorgánica I/V11G200V01404

Subjects that it is recommended to have taken before

Matemáticas: Matemáticas I/V11G200V01104
Matemáticas: Matemáticas II/V11G200V01203
Física III/V11G200V01301
Química física I/V11G200V01303

IDENTIFYING DATA**Química inorgánica I**

Subject	Química inorgánica I			
Code	V11G200V01404			
Study programme	Grao en Química			
Descriptors	ECTS Credits 9	Choose Mandatory	Year 2	Quadmester 2c
Teaching language	Castelán			
Department	Química inorgánica			
Coordinator	García Fontán, María Soledad			
Lecturers	Couce Fortunez, Maria Delfina García Fontán, María Soledad Perez Lourido, Paulo Antonio Rodriguez Arguelles, Maria Carmen Valencia Matarranz, Laura Maria			
E-mail	sgarcia@uvigo.es			
Web				
General description	En esta asignatura se estudia la química de los elementos de los grupos principales y sus compuestos. Con ella se pretende dar una visión completa y sistemática de los diferentes tipos de comportamiento químico y de los compuestos existentes			

Competencias de titulación**Code**

A1	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: aspectos principais da terminoloxía química, nomenclatura, conversións e unidades
A2	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: tipos de reacción química e as súas principais características asociadas
A9	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: propiedades características dos elementos e os seus compostos, incluíndo as relacións entre grupos e as súas variacións na táboa periódica
A12	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: trazos estruturais dos elementos químicos e os seus compostos, incluíndo a estereoquímica
A14	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: relación entre propiedades macroscópicas e propiedades de átomos e moléculas individuais, incluíndo as macromoléculas
A20	Avaliar, interpretar e sintetizar datos e información química
A25	Manexar con seguridade sustancias químicas, considerando as súas propiedades físicas e químicas, incluíndo a valoración de calquera risco específico asociado co seu uso
A26	Realizar procedementos habituais de laboratorio e utilizar a instrumentación en traballos sintéticos e analíticos
A27	Monitorizar, mediante observación e medida de propiedades físicas e químicas, acontecementos ou cambios e documentalos e rexistralos de xeito sistemático e fiable
A28	Interpretar datos derivados das observacións e medicións do laboratorio en termos do seu significado e relationalos coa teoría adecuada
B1	Comunicarse de forma oral e escrita en polo menos unha das linguas oficiais da Universidade
B3	Aprender de forma autónoma
B4	Procurar e administrar información procedente de distintas fontes
B5	Utilizar as tecnoloxías da información e das comunicacións e manexar ferramentas informáticas básicas
B6	Manexar as matemáticas, incluíndo aspectos tales como análise de erros, estimacións de ordes de magnitude, uso correcto de unidades e modos de presentación de datos
B7	Aplicar os coñecementos teóricos á práctica
B8	Traballar en equipo
B9	Traballar de forma autónoma
B12	Planificar e administrar adequadamente o tempo
B13	Tomar decisións
B14	Analizar e sintetizar información e obter conclusións
B15	Avaliar de modo crítico e construtivo o entorno e a si mesmo

Competencias de materia

Expected results from this subject

Training and Learning Results

(*)Elixir o método xeral más adecuado para a *obtención dos elementos dos grupos principais a partir dos os seus compostos presentes na natureza.	A1 A2 A9	B1 B3 B4 B9
Distinguir el diferente comportamiento químico de los elementos de los grupos principales dentro de cada grupo.	A1 A2 A9 A14	B1 B3 B4 B9
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.	A1 A2 A9 A12 A14	B1 B3 B4 B9
Deducir las propiedades físicas de un compuesto a partir del tipo de enlace entre sus componentes y su estructura.	A9 A12 A14 A20	B1 B3 B4 B9
Relacionar las propiedades físicas y químicas, de los elementos de los grupos principales y sus compuestos con sus aplicaciones.	A2 A9 A12 A14	B1 B3 B4 B9
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.	A25 A26 A27 A28	B4 B5 B6 B7 B8 B9 B12 B13 B14 B15

Contidos

Contidos	
Topic	
1. O hidrógeno.	O elemento. Átomos e iones de hidrógeno. Propiedades e reacciones do *dihidrógeno. Compostos de hidrógeno. A auga.
Gases nobres	Síntese, estrutura e reactividad dos fluoruros de xenón.
3. Halógenos	Propiedades e as súas tendencias. Pseudothalógenos. Interhalógenos. Polihaluros. Óxidos, oxoácidos e oxoaniones. Fluorocarbonos.
4. Os elementos do grupo 16	Hidruros. Halogenuros. Óxidos metálicos. Óxidos, oxohaluros e oxoaniones de azufre. Sulfuros, seleniuros e telururos metálicos.
5. Os elementos do grupo 15.	Ciclo do nitrógeno. Nitruros, azidas, amoniaco, hidrazina e hidroxilamina. Haluros. Óxidos e química redox no medio acuoso do nitrógeno. Óxidos e oxoaniones de fósforo, arsénico, antimonio e bismuto. Fosfinas.
6. Os elementos do grupo 14	Compostos simples de Carbono. Compostos simples de silicio con osíxeno. Óxidos de germanio, estaño e plomo. Compostos con nitrógeno. Compostos organometálicos.
7. Os elementos do grupo 13	Compostos simples do boro. Clústeres de boro. Síntese e reactividad de boranos superiores e borohidruros. Metaloboranos e carbaboranos. Compostos de aluminio e galio: Hidruros, halogenuros e óxidos. Oxoácidos. Química en disolución acuosa.
9. Metais alcalinos.	Compostos simples. Hidróxidos. Oxosales. Disoluciones en amoniaco líquido. Compostos de coordinación e organometálicos.
10 Metais alcalinotérreos.	Compostos simples. Hidróxidos. Carburos. Oxosales. Compostos organometálicos.
Práctica 1.	Comportamiento químico dos óxidos.
Práctica 2.	Reacciones y comportamiento químico de los halógenos
Práctica 4.	Obtención de compuestos de azufre
Práctica 5.	Combinaciones nitrógeno-hidrógeno: preparación de sulfato de hidracina
Práctica 6.	Preparación de compuestos de boro
Práctica 8	Preparación de haluros metálicos anhidros: SnI_4 y $\text{SnI}_4(\text{PPh}_3)_2$
Práctica 10	Preparación de sales de Pb(II) a partir de Minio
Práctica 7.	Preparación de un alumbré de hierro: sal de Mohr
Práctica 9.	Preparación de gel de hidróxido de aluminio
Práctica 11	Preparación de sales de Bi(III)
(*)Práctica 10	(*)Preparación de sale de Pb(II) a partir de Minio

Planificación

	Class hours	Hours outside the classroom	Total hours
Sesión maxistral	27	48	75
Resolución de problemas e/ou exercicios	13	37	50
Traballos tutelados	2	17	19
Prácticas de laboratorio	45	5	50
Outros	2	4	6
Probas de resposta curta	3	6	9
Probas de resposta longa, de desenvolvimento	3	8	11
Probas prácticas, de execución de tarefas reais e/ou simuladas.	4	1	5

*The information in the planning table is for guidance only and does not take into account the heterogeneity of the students.

Metodoloxía docente

	Description
Sesión maxistral	Exposición por parte del profesor del programa de la asignatura haciendo especial énfasis en los fundamentos y aspectos más importantes o de difícil comprensión para el alumno. Para esto el profesor/la facilitará a través de la plataforma Tem@, el material necesario para el trabajo que se realizará la semana siguiente. Se recomienda al alumno/a que trabaje previamente el material entregado polo profesor/la y consulte la bibliografía recomendada para completar la información, con el fin de seguir las explicaciones de los contenidos del programa con mayor aprovechamiento.
Resolución de problemas e/ou exercicios	Se dedicara una hora semanal para discutir y resolver cuestiones sobre el tema tratado. Los alumnos trabajarán en la resolución de los ejercicios propuestos en los boletines.
Traballos tutelados	El estudiante, de manera individual, o en grupo, elabora un documento sobre la temática de la materia o prepara seminarios, memorias, resúmenes de lecturas, etc. Se trata de una actividad para el desarrollo de las competencias transversales de la materia.
Prácticas de laboratorio	Los experimentos se realizarán de manera individual, en sesiones de 3,5 horas/semana. El alumno dispondrá de los guiones de prácticas así como el material de apoyo en la plataforma tem@ con el fin de poder tener conocimiento previo de los experimentos a realizar. Al inicio de cada sesión el profesor hará una exposición de los contenidos a desarrollar por parte de los alumnos. 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.
Outros	

Atención personalizada

Methodologies	Description
Traballos tutelados	Tiempo dedicado por el profesorado a atender las necesidades y consultas del alumnado relacionadas con temas vinculados a la materia. Estas consultas se atenderán en el horario de tutorías que cada profesor pondrá a disposición de los estudiantes.
Resolución de problemas e/ou exercicios	Tiempo dedicado por el profesorado a atender las necesidades y consultas del alumnado relacionadas con temas vinculados a la materia. Estas consultas se atenderán en el horario de tutorías que cada profesor pondrá a disposición de los estudiantes.
Outros	Tiempo dedicado por el profesorado a atender las necesidades y consultas del alumnado relacionadas con temas vinculados a la materia. Estas consultas se atenderán en el horario de tutorías que cada profesor pondrá a disposición de los estudiantes.

Avaliación

	Description	Qualification
Resolución de problemas e/ou exercicios	Se valorará la resolución por parte del alumno de una serie de problemas y/o ejercicios propuestos en el tiempo/condiciones establecido/as por el profesor. La puntuación será considerada si en la prueba larga se alcanza una calificación igual o superior a 5 puntos sobre 10	10
Traballos tutelados	Proba final para avaliación das competencias adquiridas na asignatura a desenvolver trala impartición da mesma. O valor máximo de mesma será polo tanto dun 30% e será de carácter obligatorio.	5

Prácticas de laboratorio	El profesor realizará un seguimiento del trabajo experimental realizado por el alumno en las sesiones de laboratorio , así como del cuaderno elaborado (20%) Es obligatoria la asistencia a las sesiones de laboratorio. Se realizará una prueba práctica (una sesión de laboratorio) que permitirá evaluar las competencias y destrezas adquiridas por el alumno. Dicha prueba será realizada de forma independiente para cada grupo de prácticas(10%) La puntuación será considerada si en la prueba larga se alcanza un calificación igual o superior a 5 puntos sobre 10	30
Probas de resposta curta	Pruebas breves sobre aspectos concretos de los contenidos explicados en clase. La puntuación será considerada si en la prueba larga se alcanza un calificación igual o superior a 5 puntos sobre 10	25
Probas de resposta longa, de desenvolvimento	Prueba final para evaluación de las competencias adquiridas en la asignatura a desarrollar tras la impartición de la misma. El valor máximo de misma será por lo tanto de un 30% y será de carácter obligatario. El alumno, en esta prueba, debe alcanzar un calificación igual o superior a 5 puntos sobre 10	30

Other comments on the Evaluation

La asistencia a las clases teóricas, prácticas 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), la realización de pruebas, la realización de trabajos tutelados y la entrega de un mínimo del 20% de los trabajos o ejercicios encargados por el profesor.

Evaluación en las convocatorias de Julio o no presenciales.

Los alumnos que no superen la materia al final del cuatrimestre deberán hacer una prueba escrita en el periodo de cierre de evaluación en el mes de julio. Dicha prueba tendrá un valor del 30% de la nota que substituirá los resultados de la prueba final del cuatrimestre. La calificación de entregables (actividades presenciales), laboratorio y pruebas cortas no son recuperables.

Bibliografía. Fontes de información

SHRIVER, ATKINS, **Química Inorgánica**, 4.^a edición en español,
HOUSECROFT, C. E. ; A. G. SHARPE., **Química Inorgánica**, 2.^a edición en español,
RAYNER-CANHAM, G., **Química Inorgánica Descriptiva**, 2.^a edición,
SHRIVER , ATKINS, **Inorganic Chemistry**, Fifth Edition,

Recomendaciones

Subjects that are recommended to be taken simultaneously

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

Subjects that it is recommended to have taken before

Química, física e biología: Laboratorio integrado I/V11G200V01103
Química, física e xeología: Laboratorio integrado II/V11G200V01202
Química: Química I/V11G200V01105
Química: Química II/V11G200V01204

Other comments

Materias que continúan el temario:
Química inorgánica II
Química Inorgánica III
Química de Materiales