

**ANEXO I**  
**PROPOSTA DE PROXECTOS DE INVESTIGACIÓN STEMbach**

<b>Coordinación STEMbach na Facultade/Escola UVigo:</b>	
Nome: Marta Teijeira Bautista	
Enderezo electrónico: qomaca@uvigo.es	Teléfono: 986 812 280
<b>Dirección do proxecto UVigo:</b>	
Nome: Ángeles Peña Gallego	
Enderezo electrónico: mpena@uvigo.gal	Teléfono: 650 175 997
<b>Co-dirección do proxecto UVigo:</b>	
Nome: Ricardo Mosquera Castro	
Enderezo electrónico: mosquera@uvigo.es	Teléfono: 619 520 049
<b>Bienio</b>	<b>2023-25</b>
<b>Número de participantes (máx. 4)</b>	<b>4</b>

NOTA: Os custos derivados da execución deste proxecto de investigación tales como os desprazamentos do profesorado da UVigo ao centro educativo ou doutras actividades establecidas no plan de traballo, correrán a cargo do centro educativo ao que se asigne este proxecto.

**Título**

**A enerxía nas moléculas está cuantizada**

**Resumo**

Introducir o alumnado en conceptos básicos de química cuántica e presentarlle as ferramentas da química computacional.

**Obxectivo**

O obxectivo formativo é introducir ao alumnado en conceptos básicos da química cuántica e na utilización dos métodos da química computacional. Realizarase o análise conformacional dunha molécula con varias xeometrías estables, obtendo diferencias de enerxía entre elas. Obteranse ademais niveis de enerxía electrónica, de vibración e de rotación. Así, ilustrarase o diferente orde de magnitude que os separa e como as diferentes espectroscopías se relacionan con cada un deles.

**Plan de traballo**

Cada estudante recibirá unha molécula para estudar. Deberá familiarizarse coa cuantización dos diferentes niveis enerxéticos moleculares (traslación, rotación, vibración, electrónica), cos métodos básicos de química computacional. Realizar o análise conformacional, calcular niveis de enerxía e interpretar resultados comparando con información experimental.