



| Guía Docente          |  |                    |   |          |
|-----------------------|--|--------------------|---|----------|
| Datos Identificativos |  |                    |   | 2012/13  |
| Asignatura (*)        | Química Física Aplicada  | Código             | 610500005   |          |
| Titulación            |  |                    |   |          |
| Descriptorios         |  |                    |   |          |
| Ciclo                 | Período  | Curso              | Tipo  | Créditos |
| Mestrado Oficial      | 1º cuatrimestre  | Primeiro           | Optativa  | 6        |
| Idioma                | Castelán   |                    |   |          |
| Prerrequisitos        |  |                    |   |          |
| Departamento          | Química Física e Enxeñaría Química 1   |                    |   |          |
| Coordinación          | Iglesias Martínez, Emilia  | Correo electrónico | emilia.iglesias@udc.es  |          |
| Profesorado           | Brandariz Lendoiro, María Isabel<br>Fernandez Perez, María Isabel<br>Iglesias Martínez, Emilia<br>Santaballa Lopez, Juan Arturo  | Correo electrónico | i.brandariz@udc.es<br>isabel.fernandez.perez@udc.es<br>emilia.iglesias@udc.es<br>arturo.santaballa@udc.es |          |
| Web                   | <a href="https://campusvirtual.udc.es/moodle/">https://campusvirtual.udc.es/moodle/</a>  |                    |   |          |
| Descrición xeral      | Descriptorios: Química Computacional. Química Física Supramolecular: catálisis supramolecular. Reconocimiento Molecular y Biocatálisis. Fotoquímica Aplicada: fotocatalisis. Electroquímica Aplicada: baterías, corrosión. |                    |   |          |

| Competencias da titulación |                            |
|----------------------------|----------------------------|
| Código                     | Competencias da titulación |

| Resultados da aprendizaxe   |  |  |   |
|---|--|--|---|
| Competencias de materia (Resultados de aprendizaxe)   | Competencias da titulación               |  |   |
| Adquirir coñecemento de novas estruturas moleculares, xeradas en disolución, que son fronteira dos sistemas biolóxicos. Coñecer as aplicacións destes medios na mellora de procesos químicos de separación, de síntese, de reacción, de eliminación de contaminantes, etc.  | AM4<br>AM7<br>AM8<br>AM9<br>AM11<br>AM20 |  |   |
| Analizar propiedades de novas estruturas: micelas, microemulsiones, vesículas, liposomas, ciclodextrinas, dendrímeros, clatractos, etc.. Explorar novas aplicacións destas estruturas en procesos básicos, como solubilidade, equilibrios diversos, eliminación, ..., y fundamentalmente, en reactividade.                            |  | BM1<br>BM2<br>BM5<br>BM7               | CM1<br>CM4<br>CM5<br>CM8<br>CM9<br>CM11         |
| Adquirir los conocimientos básicos encuadrados en la Química Computacional, con especial énfasis en los cálculos de la estructura electrónica. Conocer los programas informáticos más populares relacionados con la Química Computacional. Saber realizar cálculos sencillos de geometrías, energías y otras propiedades moleculares, | AM9<br>AM11                              | BM2<br>BM3<br>BM4<br>BM5<br>BM6<br>BM7 | CM1<br>CM4<br>CM5<br>CM6<br>CM9<br>CM10<br>CM11 |

| Contidos |          |
|----------|----------|
| Temas    | Subtemas |
|          |          |



|   |  |
|---|--|
| TEMA 1. Química computacional                   | <p>Introducción</p> <p>Métodos Ab Initio</p> <p>Teoría del Funcional de la Densidad</p> <p>Métodos Semiempíricos</p> <p>Funciones Base</p> <p>Mecánica Molecular</p> <p>Dinámica Molecular</p> <p>Programas de Química Computacional</p> <p>Cálculo de propiedades</p> |
| TEMA 2. Química Física Supramolecular           | <p>Tensioactivos en agua.</p> <p>Tensioactivos en disolventes</p> <p>Reactividad en medios microheterogéneos: modelo simple de la pseudofase y con intercambio iónico</p>  |
| TEMA 3. Reconocimiento Molecular y Biotatálisis | <p>Sistemas receptor-ligando.</p> <p>Receptores típicos: ciclodextrinas, poliéteres, siderófilos, dendrímeros, ..., ADN.</p> <p>Ligandos de interés: iones, fármacos, pesticidas, cosméticos.</p> <p>Aplicaciones farmacológicas e industriales.</p>                   |
| TEMA 4 Fotoquímica Aplicada                     | <p>Reacciones fotoquímicas. Fotocatálisis</p> <p>Fotoquímica Supramolecular. Fluoróforos y microentorno.</p> <p>Procesos fotoquímicos en complejos supramoleculares.</p> <p>Fluorescencia en proteínas. Tecnología del ADN</p>   |
| TEMA 5. Electroquímica Aplicada                 | <p>Valoraciones potenciométricas.</p> <p>Electrodos selectivos de iones. Potenciales de membrana.</p> <p>Baterías y celdas de combustible.</p> <p>Corrosión.</p>   |

## Planificación

| Metodoloxías / probas    | Horas presenciais | Horas non presenciais /<br>traballo autónomo | Horas totais |
|--------------------------|-------------------|--|--------------|
| Sesión maxistral         | 20                | 20   | 40           |
| Recensión bibliográfica  | 6                 | 12   | 18           |
| Seminario                | 8                 | 16   | 24           |
| Prácticas de laboratorio | 24                | 36   | 60           |
| Presentación oral        | 1                 | 2  | 3            |
| Proba de ensaio          | 4                 | 0  | 4            |
| Atención personalizada   | 1                 | 0  | 1            |

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

## Metodoloxías

| Metodoloxías             | Descrición   |
|--------------------------|--|
| Sesión maxistral         | Exposición oral para la introducción de los diferentes contenidos de la asignatura   |
| Recensión bibliográfica  | Lectura crítica de artículos científicos   |
| Seminario                | Trabajo en grupo para el estudio y debate de los artículos científicos analizados y de otros aspectos relacionados con la comprensión de los contenidos teóricos y las prácticas de laboratorio. |
| Prácticas de laboratorio | Aplicación de las tecnologías y metodologías al estudio y caracterización de sistemas químicos concretos relacionados con los contenidos de la asignatura.                                       |
| Presentación oral        | Exposición oral de los resultados obtenidos en las prácticas, de las técnicas y metodologías utilizadas en seminario conjunto y participativo de todos los alumnos.                              |



|                 |   |
|-----------------|---|
| Proba de ensaio | Prueba escrita que mida la capacidad de razonamiento, de síntesis, de redacción, ..., del alumno en preguntas de cierta amplitud. |
|-----------------|---|

### Atención personalizada

| Metodoloxías             | Descrición  |
|--------------------------|---|
| Recensión bibliográfica  | Ayuda en la interpretación trabajos científicos, en la crítica y en facilitar bibliografía relacionada. |
| Prácticas de laboratorio | Ayuda en las dificultades técnicas y metodológicas para el desarrollo de las prácticas.                 |

### Avaliación

| Metodoloxías             | Descrición  | Cualificación |
|--------------------------|---|---------------|
| Presentación oral        | Exposición de los resultados y análisis de las prácticas  | 25            |
| Sesión maxistral         | Discusión/intervención en clase   | 5             |
| Recensión bibliográfica  | Análisis crítico, comprensión del trabajo científico. Discusión sobre alternativas de estudio, mejora de resultados, perspectivas de futuro, ..., que pongan de manifiesto la capacidad creativa e innovadora del alumno. | 20            |
| Prácticas de laboratorio | Destreza, aptitudes mostradas en el laboratorio. Resultados obtenidos de la experimentación.  | 15            |
| Proba de ensaio          | Grado de asimilación y comprensión de conceptos. Capacidad de síntesis y redacción.   | 30            |
| Seminario                | Participación en la discusión de temas y desarrollo de actividades teóricas, tipo demostraciones, realización de ejercicios.  | 5             |

### Observacións avaliación

|  |
|--|
| Dentro de las prácticas de laboratorio se incluye la realización de cálculos de Química Computacional. |
|--|

### Fontes de información

|                                    |   |
|------------------------------------|---|
| <b>Bibliografía básica</b>         | <ul style="list-style-type: none"> <li>- Bockris, John O'M., Reddy, Amulya K.N. Gamboa-Aldeco, Maria. (2000). Modern electrochemistry 2B. Electroics in chemistry, engineering, biology, and environmental science. New York : Kluwer Academic / Plenum Publishers]</li> <li>- Connors, K.A. (1987). Binding Constants. The Measurement of Molecular Complex Stability. . Wiley &amp; Sons: New York,</li> <li>- Lewars, E. G. (2011). Computational Chemistry: Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics. Springer</li> <li>- J. Szejtli (1988). Cyclodextrin Technology. Kluwer Academic Publishers (The Neherlands)</li> <li>- Hinchliffe, A. (2008). Molecular Modelling for Beginners. Wiley</li> <li>- J. R. Lakowicz (2006). Principles of Fluorescence Spectroscopy. Springer Science (New York)</li> <li>- V. Balzani, F. Scandola (1991). Supramolecular Photochemistry. Ellis Horwood (Chicherter, England)</li> <li>- M. J. Rosen (1989). Surfactants and Interfacial Phenomena. John Wiley &amp; Sons</li> <li>- Raoutl Zana (1987). Surfactants in Solution. New Methods of investigation. Marcel Dekker (New York)</li> </ul> |
| <b>Bibliografía complementaria</b> | - Cramer, C. A. (2004). Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models. Wiley   |

### Recomendacións

**Materias que se recomienda ter cursado previamente**

**Materias que se recomienda cursar simultaneamente**

**Materias que continúan o temario**

### Observacións



(\*)A Guía docente é o documento onde se visualiza a proposta académica da UDC. Este documento é público e non se pode modificar, salvo casos excepcionais baixo a revisión do órgano competente dacordo coa normativa vixente que establece o proceso de elaboración de guías