



Guía Docente				
Datos Identificativos				2012/13
Asignatura (*)	Química Física Aplicada	Código	610500005	
Titulación	Mestrado Universitario en Ciencias. Tecnoloxías e Xestión Ambiental (plan 2012)			
Descritores				
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, Maria Isabel	Correo electrónico	i.brandariz@udc.es	
	Fernandez Perez, Maria Isabel		isabel.fernandez.perez@udc.es	
	Iglesias Martínez, Emilia		emilia.iglesias@udc.es	
	Santaballa Lopez, Juan Arturo		arturo.santaballa@udc.es	
Web	https://campusvirtual.udc.es/moodle/			
Descrición xeral	Descritores: 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
A4	Coñecer en profundidade as características e fundamentos de diversos modelos químicos para o estudo de sistemas orgánicos, inorgánicos e biolóxicos, incluídos os materiais con proxección tecnolóxica.
A7	Coñecer o marco teórico e as aplicacións da electroquímica e da fotocatalise nos campos da enerxía e o medio ambiente.
A8	Coñecer os fundamentos das interaccións intermoleculares e as súas aplicacións no campo da catálise supramolecular, recoñecemento molecular e biocatálise.
A9	Coñecer algunhas aplicacións básicas da química computacional e dos programas de cálculo máis utilizados nos ámbitos da química e o medio ambiente.
A11	Coñecer as distintas técnicas experimentais e computacionais orientadas á caracterización de mecanismos de reacción.
A20	Coñecemento dos principais tipos de produtos naturais: enzimas, receptores moleculares, etc. Entender a súa participación en procesos de catálise e autoensamblaxe.
B1	Posuír e comprender coñecementos que acheguen unha base ou oportunidade de ser orixinais no desenvolvemento e/ou aplicación de ideas, a miúdo nun contexto de investigación.
B2	Que os estudantes saiban aplicar os coñecementos adquiridos e a súa capacidade de resolución de problemas en contornas novas ou pouco coñecidas dentro de contextos máis amplos (ou multidisciplinares) relacionados coa súa área de estudo.
B3	Que os estudantes sexan capaces de integrar coñecementos e enfrontarse á complexidade de formular xuízos a partir dunha información que, sendo incompleta ou limitada, inclúa reflexións sobre as responsabilidades sociais e éticas vinculadas á aplicación dos seus coñecementos e xuízos.
B4	Que os estudantes saiban comunicar as súas conclusións e os coñecementos e razóns últimas que as sustentan a públicos especializados e non especializados dun modo claro e sen ambigüedades.
B5	Que os estudantes posúan as habilidades de aprendizaxe que lles permitan continuar estudando dun modo que haberá de ser en gran medida autodirixido ou autónomo.
B6	Ser capaz de analizar datos e situacións, xestionar a información dispoñible e sintetizala, todo iso a un nivel especializado.
B7	Ser capaz de planificar adecuadamente desenvolvementos experimentais, a un nivel especializado.
C1	Ser capaz de traballar en equipos, especialmente nos interdisciplinares e internacionais.
C4	Expresarse correctamente, tanto de forma oral coma escrita, nas linguas oficiais da comunidade autónoma.
C5	Dominar a expresión e a comprensión de forma oral e escrita dun idioma estranxeiro.
C6	Utilizar as ferramentas básicas das tecnoloxías da información e as comunicacións (TIC) necesarias para o exercicio da súa profesión e para a aprendizaxe ao longo da súa vida.
C8	Entender a importancia da cultura emprendedora e coñecer os medios ao alcance das persoas emprendedoras.



C9	Valorar criticamente o coñecemento, a tecnoloxía e a información dispoñible para resolver os problemas cos que deben afrontarse.
C10	Asumir como profesional e cidadán a importancia da aprendizaxe ao longo da vida.
C11	Valorar a importancia que ten a investigación, a innovación e o desenvolvemento tecnolóxico no avance socioeconómico e cultural da sociedade.

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 AM7 AM8 AM9 AM11 AM20		
Analizar propiedades de novas estruturas: micelas, microemulsiones, vesículas, liposomas, ciclodextrinas, dendrímeros, clatratos, etc.. Explorar novas aplicacións destas estruturas en procesos básicos, como solubilidade, equilibrios diversos, eliminación, ..., y fundamentalmente, en reactividad.		BM1 BM2 BM5 BM7	CM1 CM4 CM5 CM8 CM9 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 AM11	BM2 BM3 BM4 BM5 BM6 BM7	CM1 CM4 CM5 CM6 CM9 CM10 CM11

Contidos	
Temas	Subtemas
TEMA 1. Química computacional	Introducción Métodos Ab Initio Teoría del Funcional de la Densidad Métodos Semiempíricos Funciones Base Mecánica Molecular Dinámica Molecular Programas de Química Computacional Cálculo de propiedades
TEMA 2. Química Física Supramolecular	Tensioactivos en agua. Tensioactivos en disolventes Reactividad en medios microheterogéneos: modelo simple de la pseudofase y con intercambio iónico
TEMA 3. Reconocimiento Molecular y Biocatálisis	Sistemas receptor-ligando. Receptores típicos: ciclodextrinas, poliéteres, siderófilos, dendrímeros, ..., ADN. Ligandos de interés: iones, fármacos, pesticidas, cosméticos. Aplicaciones farmacológicas e industriales.



TEMA 4 Fotoquímica Aplicada	Reacciones fotoquímicas. Fotocatálisis Fotoquímica Supramolecular. Fluoróforos y microentorno. Procesos fotoquímicos en complejos supramoleculares. Fluorescencia en proteínas. Tecnología del ADN
TEMA 5. Electroquímica Aplicada	Valoraciones potenciométricas. Electrodos selectivos de iones. Potenciales de membrana. Baterías y celdas de combustible. Corrosión.

Planificación			
Metodoloxías / probas	Horas presenciais	Horas non presenciais / traballo autónomo	Horas totais
Sesión maxistral	20	20	40
Recensión bilbiográfica	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 bilbiográfica	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 bilbiográfica Prácticas de laboratorio	Ayuda en la interpretación trabajos científicos, en la crítica y en facilitar bibliografía relacionada. 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 bilbiográfica	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

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