



Guía Docente				
Datos Identificativos				2013/14
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 Fernandez Perez, María Isabel Iglesias Martínez, Emilia Santaballa Lopez, Juan Arturo	Correo electrónico	i.brandariz@udc.es isabel.fernandez.perez@udc.es emilia.iglesias@udc.es arturo.santaballa@udc.es	
Web	https://campusvirtual.udc.es/moodle/			
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 AM7 AM8 AM9 AM11 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 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	<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 / 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

Bibliografía básica	<ul style="list-style-type: none"> - 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] - 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 Neherlands) - 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 (Chicherter, England) - M. J. Rosen (1989). Surfactants and Interfacial Phenomena. John Wiley & Sons - Raoutl Zana (1987). Surfactants in Solution. New Methods of investigation. Marcel Dekker (New York)
Bibliografía complementaria	- 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