



| Guía Docente | | | | |
|-----------------------|--|--------------------|---|----------|
| Datos Identificativos | | | | 2016/17 |
| 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 | | | |
| Modalidade docente | Presencial | | | |
| Prerrequisitos | | | | |
| Departamento | Química Física e Enxeñaría Química 1 | | | |
| Coordinación | Iglesias Martinez, Emilia | Correo electrónico | emilia.iglesias@udc.es | |
| Profesorado | Brandariz Lendoiro, María Isabel Fernandez Perez, Maria Isabel Iglesias Martinez, 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 | Descritores: Química Computacional. Química Física Supramolecular: catálisis supramolecular. Reconocimiento Molecular y Biotatálisis. Fotoquímica Aplicada: fotocatalisis. Electroquímica Aplicada: baterías, corrosión. | | | |

| Competencias / Resultados do título | |
|-------------------------------------|--|
| Código | Competencias / Resultados do título |
| A1 | Coñecemento das realidades interdisciplinares da Química e do Medio Ambiente, dos temas punteiros nestas disciplinas e das perspectivas de futuro. |
| 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 biotatálise. |
| 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. |
| C3 | Ser capaz de adaptarse a situacións novas, mostrando creatividade, iniciativa, espírito emprendedor e capacidade de liderado. |
| 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. |
| C9 | Valorar criticamente o coñecemento, a tecnoloxía e a información dispoñible para resolver os problemas cos que deben enfrontarse. |
| 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 | | | |
|--|---|--|---|
| Resultados de aprendizaxe | Competencias / Resultados do título | | |
| 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. | AM1 AM4 AM7 AM8 AM9 AM11 AM20 | | |
| Analizar propiedades de novas estruturas: micelas, microemulsiones, vesículas, liposomas, ciclodextrinas, dendrímeros, nanopartículas, etc.. Explorar novas aplicacións destas estruturas en procesos básicos, como solubilidade, equilibrios diversos, eliminación, detección de compostos de interés, ..., y fundamentalmente, en reactividad. | | BM1 BM2 BM5 BM7 | CM1 CM3 CM4 CM5 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 do Funcional da Densidade Métodos Semiempíricos Funcións Base Mecánica Molecular Dinámica Molecular Programas de Química Computacional Cálculo de propiedades |
| TEMA 2. Química Física Supramolecular | Tensioactivos en auga. Tensioactivos en disolventes Reactividade en medios microheteroxéneos: modelo simple da pseudofase e con intercambio iónico |



| | |
|---|---|
| TEMA 3. Recoñecemento Molecular e Biotatálise | Sistemas receptor-ligando. Receptores típicos: ciclodextrinas, poliéteres, siderófilos, dendrímeros, ..., ADN. Ligandos de interese: ións, fármacos, pesticidas, cosméticos. Aplicacións farmacolóxicas e industriais. |
| TEMA 4 Fotoquímica Aplicada | Reaccións fotoquímicas. Fotocatálise Fotoquímica Supramolecular. Fluoróforos e microentorno. Procesos fotoquímicos en complexos supramoleculares. Fluorescencia en proteínas. Tecnoloxía do ADN |
| TEMA 5. Electroquímica Aplicada | Valoracións potenciométricas. Electrodos selectivos de ións. Potenciais de membrana. Baterías e celdas de combustible. Corrosión. |

| Planificación | | | | |
|--------------------------|---------------------------|---|-------------------------|--------------|
| Metodoloxías / probas | Competencias / Resultados | Horas lectivas (presenciais e virtuais) | Horas traballo autónomo | Horas totais |
| Sesión maxistral | B3 B4 | 20 | 20 | 40 |
| Recensión bilbiográfica | B5 B6 B7 C5 | 6 | 12 | 18 |
| Seminario | A9 A11 B2 C1 | 8 | 16 | 24 |
| Prácticas de laboratorio | B1 B5 B6 B7 C3 C9 C11 | 24 | 36 | 60 |
| Presentación oral | C4 C6 C10 | 1 | 2 | 3 |
| Proba de ensaio | A1 A4 A7 A8 A20 | 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 a introducción dos diferentes contidos da asignatura |
| Recensión bilbiográfica | Lectura crítica de artigos científicos |
| Seminario | Traballo en grupo para o estudo e debate dos artigos científicos analizados e doutros aspectos relacionados coa comprensión dos contidos teóricos e as prácticas de laboratorio. |
| Prácticas de laboratorio | Aplicación das tecnoloxías e metodoloxías o estudo e caracterización de sistemas químicos concretos relacionados cos contidos da asignatura. |
| Presentación oral | Exposición oral dos resultados obtidos nas prácticas, das técnicas e metodoloxías utilizadas en seminario conxunto e participativo de tódolos alumnos. |
| Proba de ensaio | Proba escrita que mida a capacidade de razonamento, de síntese, de redacción, ..., do alumno en preguntas de certa amplitude. |

| Atención personalizada | |
|---|--|
| Metodoloxías | Descrición |
| Recensión bilbiográfica Prácticas de laboratorio | Axuda na interpretación de traballos científicos, na crítica e en facilitar bibliografía relacionada. Axuda nas dificultades técnicas e metodolóxicas para o desenvolvemento das prácticas. |

| Avaliación |
|------------|
|------------|



| Metodoloxías | Competencias / Resultados | Descrición | Cualificación |
|--------------------------|---------------------------|---|---------------|
| Presentación oral | C4 C6 C10 | Exposición dos resultados e análise das prácticas. | 15 |
| Sesión maxistral | B3 B4 | Discusión/intervención na clase. | 5 |
| Recensión bibliográfica | B5 B6 B7 C5 | Análise crítica, comprensión do traballo científico. Discusión sobre alternativas de estudo, mellora de resultados, perspectivas de futuro, ..., que poñan de manifesto a capacidade creativa e innovadora do alumno. | 30 |
| Prácticas de laboratorio | B1 B5 B6 B7 C3 C9 C11 | Destreza, aptitudes amosadas no laboratorio. Resultados obtidos na experimentación. | 15 |
| Proba de ensaio | A1 A4 A7 A8 A20 | Grao de asimilación e comprensión dos conceptos. Capacidade de síntese e redacción. | 30 |
| Seminario | A9 A11 B2 C1 | Participación na discusión dos temas e desenrolo das actividades teóricas, tipo demostracións, realización de exercicios. | 5 |

Observacións avaliación

Fontes de información

| | |
|------------------------------------|--|
| Bibliografía básica | <ul style="list-style-type: none"> - J. R. Lakowicz (2006). Principles of Fluorescence Spectroscopy. Springer Science (New York) - Connors, K.A. (1987). Binding Constants. The Measurement of Molecular Complex Stability. . Wiley & Sons: 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) - J. Szejtli (1988). Cyclodextrin Technology. Kluwer Academic Publishers (The Netherlands) - 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] - Lewars, E. G. (2011). Computational Chemistry: Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics. Springer - Hinchliffe, A. (2008). Molecular Modelling for Beginners. Wiley |
| Bibliografía complementaria | - Cramer, C. A. (2004). Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models. Wiley |

Recomendacións

Materias que se recomenda ter cursado previamente

Materias que se recomenda 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