



Guía Docente				
Datos Identificativos				2017/18
Asignatura (*)	Química Física Aplicada	Código	610500005	
Titulación				
Descriptoros				
Ciclo	Período	Curso	Tipo	Créditos
Mestrado Oficial	1º cuatrimestre	Primeiro	Optativa	6
Idioma	CastelánInglés			
Modalidade docente	Presencial			
Prerrequisitos				
Departamento	Química			
Coordinación	Iglesias Martinez, Emilia	Correo electrónico	emilia.iglesias@udc.es	
Profesorado	Iglesias Martinez, Emilia	Correo electrónico	emilia.iglesias@udc.es	
Web	<a href="https://campusvirtual.udc.es/moodle/">https://campusvirtual.udc.es/moodle/</a>			
Descrición xeral	Descriptoros: Química Computacional. Química Física Supramolecular: catálisis supramolecular. Reconocimiento Molecular y Biocatálisis. Fotoquímica Aplicada: fotocatalisis. Electroquímica Aplicada: baterías, corrosión.			

Competencias / Resultados do título	
Código	Competencias / Resultados do título

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 solubilidad, equilibrios diversos, eliminación, detección de compuestos 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	<p>Introducción</p> <p>Métodos Ab Initio</p> <p>Teoría do Funcional da Densidade</p> <p>Métodos Semiempíricos</p> <p>Funcións 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 auga.</p> <p>Tensioactivos en disolventes</p> <p>Reactividade en medios microheteroxéneos: modelo simple da pseudofase e con intercambio iónico</p>
TEMA 3. Recoñecemento Molecular e Biocatálise	<p>Sistemas receptor-ligando.</p> <p>Receptores típicos: ciclodextrinas, poliéteres, siderófilos, dendrímeros, ..., ADN.</p> <p>Ligandos de interese: ións, fármacos, pesticidas, cosméticos.</p> <p>Aplicacións farmacolóxicas e industriais.</p>
TEMA 4 Fotoquímica Aplicada	<p>Reaccións fotoquímicas. Fotocatálise</p> <p>Fotoquímica Supramolecular. Fluoróforos e microentorno.</p> <p>Procesos fotoquímicos en complexos supramoleculares.</p> <p>Fluorescencia en proteínas. Tecnoloxía do ADN</p>
TEMA 5. Electroquímica Aplicada	<p>Valoracións potenciométricas.</p> <p>Electrodos selectivos de ións. Potenciais de membrana.</p> <p>Baterías e celdas de combustible.</p> <p>Corrosión.</p>

### Planificación

Metodoloxías / probas	Competencias / Resultados	Horas lectivas (presenciais e virtuais)	Horas traballo autónomo	Horas totais
Sesión maxistral	B3 B4	13	13	26
Recensión bibliográfica	B5 B6 B7 C5	1	10	11
Seminario	A11 A9 B2 C1	7	28	35
Prácticas de laboratorio	B1 B5 B6 B7 C3 C9 C11	20	40	60
Presentación oral	C4 C6 C10	1	5	6
Proba de ensaio	A1 A4 A7 A8 A20	3	9	12
Atención personalizada		0	0	0

\*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 bibliográfica	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
Presentación oral	Axuda na interpretación de traballos científicos, na crítica e en facilitar bibliografía relacionada. Axuda nas dificultades técnicas e metodolóxicas para o desenvolvemento das prácticas.
Sesión maxistral	
Recensión bilbiográfica	
Prácticas de laboratorio	
Proba de ensaio	
Seminario	

### 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 bilbiográfica	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	A11 A9 B2 C1	Participación na discusión dos temas e desenrolo das actividades teóricas, tipo demostracions, realización de exercicios.	5

### Observacións avaliación

--

### Fontes de información

<b>Bibliografía básica</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- J. R. Lakowicz (2006). Principles of Fluorescence Spectroscopy. Springer Science (New York)</li> <li>- Connors, K.A. (1987). Binding Constants. The Measurement of Molecular Complex Stability. . Wiley &amp; Sons: New York,</li> <li>- V. Balzani, F. Scandola (1991). Supramolecular Photochemistry. Ellis Horwood (Chichester, England)</li> <li>- M. J. Rosen (1989). Surfactants and Interfacial Phenomena. John Wiley &amp; Sons</li> <li>- Raouf Zana (1987). Surfactants in Solution. New Methods of investigation. Marcel Dekker (New York)</li> <li>- J. Szejtli (1988). Cyclodextrin Technology. Kluwer Academic Publishers (The Netherlands)</li> <li>- 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]</li> <li>- Lewars, E. G. (2011). Computational Chemistry: Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics. Springer</li> <li>- Hinchliffe, A. (2008). Molecular Modelling for Beginners. Wiley</li> </ul>
<b>Bibliografía complementaria</b>	- 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