Guia docente					
Datos Identificativos					2020/21
Asignatura (*)	Química Física Aplicada			Código	610500005
Titulación	Mestrado Universitario en Ciencias, Tecnoloxías e Xestión Ambiental (plan 2012)				
Descriptores					
Ciclo	Periodo	Curso		Tipo	Créditos
Máster Oficial	1º cuatrimestre	Primero		Optativa	6
Idioma	CastellanoInglés				
Modalidad docente	Presencial				
Prerrequisitos					
Departamento	Química				
Coordinador/a	Iglesias Martinez, Emilia		Correo electrónico	emilia.iglesias@udc.es	
Profesorado	Iglesias Martinez, Emilia		Correo electrónico	emilia.iglesias@udc.es	
Web	https://campusvirtual.udc.es/moodle/				
Descripción general	Descriptores: Química Computacional. Química Física Supramolecular: catálisis supramolecular. Reconocimiento Molecular y Biocatálisis. Fotoquímica Aplicada: fotocatálisis. Electroquímica Aplicada: baterias, corrosión.				
Plan de contingencia	1. Modificaciones en los contenidos -No se realizarán cambios 2. Metodologías *Metodologías docentes que se mantienen (formato on-line): -Sesión magistral -Trabajos tutelados -Atención personalizada -Prueba de respuesta múltiple -Prueba de ensayo *Metodologías docentes que se modifican: -Prácticas de Laboratorio(no se realizará y se sustituye por trabajos bibliográficos tutelados) 3. Mecanismos de atención personalizada al alumnado -Correo electrónico: diariamente -Moodle; diariamente -Teams: al menos una sesión semanal y siempre a petición del alumno 4. Modificaciones en la evaluación -La nota de prácticas se suma a la de trabajos tutelados. *Observaciones de evaluación: -Se mantienen las mismas que figuran en la guia docente 5. Modificaciones de la bibliografía o webgrafía -Se facilitará todo el material de trabajo a través de Moodle				

Competencias del título	
Código	Competencias del título
A1	Conocimiento de las realidades interdisciplinares de la Química y del Medio Ambiente, de los temas punteros en estas disciplinas y de las perspectivas de futuro.
A7	Conocer el marco teórico y las aplicaciones de la electroquímica y de la fotocatálisis en los campos de la energía y el medio ambiente.

A8	Conocer los fundamentos de las interacciones intermoleculares y sus aplicaciones en el campo de la catálisis supramolecular, reconocimiento molecular y biocatálisis.
A9	Conocer algunas aplicaciones básicas de la química computacional y de los programas de cálculo más utilizados en los ámbitos de la química y el medio ambiente.
A11	Conocer las distintas técnicas experimentales y computacionales orientadas a la caracterización de mecanismos de reacción.
A20	Conocimiento de los principales tipos de productos naturales: enzimas, receptores moleculares, etc. Entender su participación en procesos de catálisis y autoensamblaje.
B1	Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación.
B2	Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.
B3	Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios.
B5	Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.
C1	Ser capaz de trabajar en equipos, especialmente en los interdisciplinares e internacionales.
C3	Ser capaz de adaptarse a situaciones nuevas, mostrando creatividad, iniciativa, espíritu emprendedor y capacidad de liderazgo.
C5	Dominar la expresión y la comprensión de forma oral y escrita de un idioma extranjero.
C6	Utilizar las herramientas básicas de las tecnologías de la información y las comunicaciones (TIC) necesarias para el ejercicio de su profesión y para el aprendizaje a lo largo de su vida.
C9	Valorar críticamente el conocimiento, la tecnología y la información disponible para resolver los problemas con los que deben enfrentarse.
C10	Asumir como profesional y ciudadano la importancia del aprendizaje a lo largo de la vida.
C11	Valorar la importancia que tiene la investigación, la innovación y el desarrollo tecnológico en el avance socioeconómico y cultural de la sociedad.

Resultados de aprendizaje			
Resultados de aprendizaje	Competencias del título		
Analizar las propiedades de nuevas microestructuras: micelas, microemulsiones, vesículas, liposomas, ciclodextrinas, dendrímeros, nanopartículas, etc.. Explorar nuevas aplicaciones de estas estructuras en procesos básicos, como solubilidad, equilibrios diversos, eliminación, detección de compuestos de interés, ..., y fundamentalmente, en reactividad.		BM1 BM2 BM3 BM5	CM1 CM3 CM5 CM9 CM11
Adquirir el conocimiento de nuevas estructuras moleculares, originadas en disolución, que son frontera de sistemas biológicos. Conocer las aplicaciones de estos medios en la optimización de procesos químicos de separación, de síntesis, de reacción, de eliminación de contaminantes, etc.	AM1 AM7 AM8 AM9 AM11 AM20		
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,	AM1 AM7 AM8 AM9 AM11	BM1 BM2 BM3 BM5	CM1 CM3 CM5 CM6 CM9 CM10 CM11

Contenidos

Tema	Subtema
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 auga. Tensioactivos en disolventes Reactividade en medios microheteroxéneos: modelo simple da pseudofase e con intercambio iónico
TEMA 3. Recoñecemento Molecular e Biocatálise	Sistemas receptor-ligando. Receptores típicos: ciclodextrinas, poliéteres, sideróforos, 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	Valoraciones potenciométricas. Electrodos selectivos de ións. Potenciais de membrana. Baterías e celdas de combustible. Corrosión.

Planificación				
Metodologías / pruebas	Competéncias	Horas presenciales	Horas no presenciales / trabajo autónomo	Horas totales
Sesión magistral	A7 A8 A9 A11 A20	15	15	30
Prácticas de laboratorio	B1 B5 C3 C1 C9 C11	20	40	60
Trabajos tutelados	B1 B2 B3 C5 C6 C10	8	20	28
Prueba de ensayo/desarrollo	A1 A7 A8 A9 A20	4	8	12
Prueba de respuesta múltiple	A1 A7 A8 A9 A20	4	16	20
Atención personalizada		0	0	0
(*)Los datos que aparecen en la tabla de planificación són de carácter orientativo, considerando la heterogeneidad de los alumnos				

Metodologías	
Metodologías	Descripción
Sesión magistral	Se describirán las líneas generales de la asignatura y sus contenidos fundamentales.
Prácticas de laboratorio	Aplicación de las tecnologías y metodologías al estudio y caracterización de sistemas químicos concretos relacionados con los contenidos de la asignatura.
Trabajos tutelados	El alumno leerá uno o dos artículos recientes relacionados con temas de química supramolecular para preparar un informe en el que sintetizará la información y resultados relevantes.
Prueba de ensayo/desarrollo	Prueba escrita para evaluar la capacidad de razonamiento, de síntesis, de redacción, ..., en cuestiones prácticas de cierta amplitud
Prueba de respuesta múltiple	Prueba tipo test relacionada con la asimilación y comprensión de conceptos teóricos y/o prácticos.

Atención personalizada	
Metodologías	**Descripción**
Trabajos tutelados Prácticas de laboratorio	Se recomienda el uso de las tutorías (ya sea de forma presencial, por correo electrónico, a través de los foros de Moodle o mediante Teams) para resolver cualquier duda surgida en relación a cualquier tema o tipo de metodología. El profesorado de la asignatura estará disponible para resolver cualquier necesidad o atender cualquier consulta en el horario de tutorías establecido. Los alumnos a tiempo parcial o con dispensa académica de asistencia serán atendidos en tutorías, tanto presenciales como por medios telemáticos, siempre que lo necesiten.

Evaluación			
Metodologías	**Competéncias**	**Descripción**	**Calificación**
Trabajos tutelados	B1 B2 B3 C5 C6 C10	Se evalúa el informe, que se puede elaborar siguiendo un cuestionario en el que se especifica el sistema objeto de estudio, la técnica y metodología empleada, los resultados obtenidos, conclusiones más relevantes y la perspectiva de futuro propuesta por el alumno.	20
Prueba de ensayo/desarrollo	A1 A7 A8 A9 A20	Prueba de extensión reducida para medir el grado de asimilación y comprensión de los conceptos y la capacidad de síntesis y redacción. Se podrá realizar a través de Moodle o presencial.	30
Prácticas de laboratorio	B1 B5 C3 C1 C9 C11	Destreza, aptitudes mostradas en el laboratorio. Resultados obtenidos en la experimentación.	20
Prueba de respuesta múltiple	A1 A7 A8 A9 A20	Prueba test de respuesta múltiple para responder a través de Moodle en un tiempo limitado sobre contenidos básicos y conceptuales del temario	30

Observaciones evaluación

Fuentes de información	
Básica	- 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 (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) - J. Szejtli (1988). Cyclodextrin Technology. Kluwer Academic Publishers (The Neherlands) - Bockris, John O'M., Reddy, Amulya K.N. Gamboa-Aldeco, Maria. (2000). Modern electrochemistry 2B. Electrodics 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
Complementária	- Cramer, C. A. (2004). Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models. Wiley

Recomendaciones
Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente
Asignaturas que se recomienda cursar simultáneamente
Asignaturas que continúan el temario

Otros comentarios

(*) La Guía Docente es el documento donde se visualiza la propuesta académica de la UDC. Este documento es público y no se puede modificar, salvo cosas excepcionales bajo la revisión del órgano competente de acuerdo a la normativa vigente que establece el proceso de elaboración de guías