



Guía Docente				
Datos Identificativos				2021/22
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	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	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.			
Plan de continxencia	<p>1. Modificacións nos contidos</p> <ul style="list-style-type: none">-Non se modificarán <p>2. Metodoloxías</p> <p>*Metodoloxías docentes que se manteñen:</p> <ul style="list-style-type: none">-Todas <p>*Metodoloxías docentes que se modifican</p> <p>No caso de existiren problemas de aforo nos espazos designados para a realización de actividades presenciais, reservaranse espazos adicionais nos que os alumnos poidan seguir as actividades a través da plataforma TEAMS. No caso das actividades prácticas, os grupos desdobraranse para adaptarse á capacidade do laboratorio</p> <p>3. Mecanismos de atención personalizada ao alumnado</p> <ul style="list-style-type: none">-Correo electrónico-Foros de Moodle-Videochamadas a través de Teams <p>4. Modificacións na avaliación</p> <ul style="list-style-type: none">-Non hay modificacións. <p>*Observacións de avaliación:</p> <p>5. Modificacións da bibliografía ou webgrafía</p> <ul style="list-style-type: none">-Non se modifica (todo o material será dixitalizado e estará dispoñible en Moodle) <p>(II) ADAPTACIÓN PREVISTA NO CENTRO PARA OS CASOS NOS QUE SE SUPERE O AFORO DA AULA ASIGNADA PARA A MATERIA.</p> <p>A adaptación consistirá na atribución de dúas ou máis aulas á materia e a impartición da clase a través de TEAMS para o alumnado que non estea na aula coa persoa que imparte a materia.</p>			

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.



A7	Coñecer o marco teórico e as aplicacións da electroquímica e da fotocátalise 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.
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.
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.
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		
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 compustos de interés, ..., y fundamentalmente, en reactividad.		BM1 BM2 BM3 BM5	CM1 CM3 CM5 CM9 CM11
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 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

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	A7 A8 A9 A11 A20	15	15	30
Prácticas de laboratorio	B1 B5 C3 C1 C9 C11	20	40	60
Traballos tutelados	B1 B2 B3 C5 C6 C10	8	20	28
Proba de ensaio	A1 A7 A8 A9 A20	4	8	12
Proba de resposta múltiple	A1 A7 A8 A9 A20	4	16	20
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	Descrición das liñas xerais da asignatura e introducción dos contidos fundamentais
Prácticas de laboratorio	Aplicación das tecnoloxías e metodoloxías o estudo e caracterización de sistemas químicos concretos relacionados cos contidos da asignatura.
Traballos tutelados	O alumno lerá un ou dous artigos recentes relacionados con temas de química supramolecular para preparar un informe que resuma a información e os resultados relevantes.
Proba de ensaio	Proba escrita para valorar a capacidade de razoamento, síntese, e de redacción ... en cuestións prácticas de certa extensión.
Proba de resposta múltiple	Proba tipo test relacionada coa asimilación e a comprensión de conceptos teóricos e / ou prácticos.



Atención personalizada

Metodoloxías	Descrición
Traballos tutelados Prácticas de laboratorio	Recoméndase o uso de titorías (ben de xeito persoal, por correo electrónico, a través dos foros de Moodle ou a través de Teams) para resolver calquera dúbida que xurda en relación con calquera tema ou tipo de metodoloxía. O profesorado da materia estará dispoñible para resolver calquera necesidade ou responder a calquera dúbida durante o horario de titoría establecido. Os estudantes a tempo parcial ou aqueles con exención de asistencia académica serán atendidos en titorías, tanto de xeito persoal como telemático, sempre que o precisen.

Avaliación

Metodoloxías	Competencias / Resultados	Descrición	Cualificación
Traballos tutelados	B1 B2 B3 C5 C6 C10	Avaliase o informe, que se pode preparar seguindo un cuestionario que especifique o sistema obxecto de estudo, a técnica e metodoloxía empregada, os resultados obtidos, as conclusións máis relevantes e a perspectiva de futuro que propón o alumno.	20
Proba de ensaio	A1 A7 A8 A9 A20	Proba de lonxitude reducida para medir o grao de asimilación e comprensión de conceptos e a capacidade de síntese e escritura. Pódese realizar a través de Moodle ou de xeito presencial.	30
Prácticas de laboratorio	B1 B5 C3 C1 C9 C11	Destreza, aptitudes amosadas no laboratorio. Resultados obtidos na experimentación.	20
Proba de resposta múltiple	A1 A7 A8 A9 A20	Proba de elección múltiple para responder a través de Moodle nun tempo limitado sobre contidos básicos e conceptuais do temario.	30

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	<ul style="list-style-type: none">- 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