



Guía Docente				
Datos Identificativos			2022/23	
Asignatura (*)	Química Física Aplicada		Código	610500005
Titulación				
Descriptor				
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	Brandariz Lendoiro, Maria Isabel	Correo electrónico	i.brandariz@udc.es	
	Fernandez Perez, Maria Isabel		isabel.fernandez.perez@udc.es	
	Iglesias Martinez, Emilia		emilia.iglesias@udc.es	
	Santaballa Lopez, Juan Arturo		arturo.santaballa@udc.es	
Web	https://campusvirtual.udc.es/moodle/			
Descrición xeral	Descriptor: Química Computacional. Química Física Supramolecular: catálisis supramolecular. Reconocimiento Molecular y Biocatálisis. Fotoquímica Aplicada: fotocatalisis. Electroquímica Aplicada: baterías, corrosión.			

Competencias do título	
Código	Competencias do título

Resultados da aprendizaxe			
Resultados de aprendizaxe		Competencias do título	
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 CM1 BM2 CM3 BM3 CM5 BM5 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 CM1 BM2 CM3 BM3 CM5 BM5 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 Biocatálise	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	Horas presenciais	Horas non presenciais / 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	Descrición	Cualificación
Traballos tutelados	B1 B2 B3 C5 C6 C10	Avalíase 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.	40
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.	10
Prácticas de laboratorio	B1 B5 C3 C1 C9 C11	Destreza, aptitudes amosadas no laboratorio. Resultados obtidos na experimentación.	40
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.	10

Observacións avaliación

Fontes de información	
Bibliografía 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 (Chichester, England) - M. J. Rosen (1989). Surfactants and Interfacial Phenomena. John Wiley & Sons - Raoult 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. Electroics 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