



Guía docente				
Datos Identificativos			2016/17	
Asignatura (*)	Química Física Aplicada		Código	610500005
Titulación	Mestrado Universitario en Ciencias. Tecnoloxías e Xestión Ambiental (plan 2012)			
Descriptor				
Ciclo	Periodo	Curso	Tipo	Créditos
Máster Oficial	1º cuatrimestre	Primero	Optativa	6
Idioma	Castellano			
Modalidad docente	Presencial			
Prerrequisitos				
Departamento	Química Física e Enxeñaría Química 1			
Coordinador/a	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/			
Descripción general	Descriptor: Química Computacional. Química Física Supramolecular: catálisis supramolecular. Reconocimiento Molecular y Biocatálisis. Fotoquímica Aplicada: fotocatalisis. Electroquímica Aplicada: baterías, corrosión.			

Competencias del título	
Código	Competencias del título
A1	Conocimiento de las realidades interdisciplinarias de la Química y del Medio Ambiente, de los temas punteros en estas disciplinas y de las perspectivas de futuro.
A4	Conocer en profundidad las características y fundamentos de diversos modelos químicos para el estudio de sistemas orgánicos, inorgánicos y biológicos, incluidos los materiales con proyección tecnológica.
A7	Conocer el marco teórico y las aplicaciones de la electroquímica y de la fotocatalisis 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.
B4	Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades.
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.
B6	Ser capaz de analizar datos y situaciones, gestionar la información disponible y sintetizarla, todo ello a un nivel especializado.
B7	Ser capaz de planificar adecuadamente desarrollos experimentales, a un nivel especializado.
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.
C4	Expresarse correctamente, tanto de forma oral como escrita, en las lenguas oficiales de la comunidad autónoma.

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	
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 AM4 AM7 AM8 AM9 AM11 AM20	
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 CM1 BM2 CM3 BM5 CM4 BM7 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 CM1 BM3 CM4 BM4 CM5 BM5 CM6 BM6 CM9 BM7 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, 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 no presenciais / traballo autónomo	Horas totais
Sesión magistral	B3 B4	20	20	40
Recensión bibliográfica	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 ensayo/desarrollo	A1 A4 A7 A8 A20	4	0	4
Atención personalizada		1	0	1
(*)Los datos que aparecen en la tabla de planificación són de carácter orientativo, considerando la heterogeneidad de los alumnos				

Metodoloxías	
Metodoloxías	Descrición
Sesión magistral	Exposición oral para la introducción de los diferentes contenidos de la asignatura
Recensión bibliográfica	Lectura crítica de artículos científicos
Seminario	Trabaja en grupo para el estudio y debate de los artículos científicos analizados y de otros aspectos relacionados con la comprensión de los contenidos teóricos y las prácticas de laboratorio.
Prácticas de laboratorio	Aplicación de las tecnologías y metodoloxías al estudio y caracterización de sistemas químicos concretos relacionados con los contenidos de la asignatura.
Presentación oral	Exposición oral de los resultados obtenidos en las prácticas, de las técnicas y metodoloxías utilizadas en seminario conjunto y participativo de todos los alumnos.
Proba de ensayo/desarrollo	Proba escrita que mida la capacidad de razonamento, de síntesis, de redacción, ..., del alumno en preguntas de cierta amplitud.

Atención personalizada	
Metodoloxías	Descrición
Recensión bibliográfica	Ayuda en la interpretación trabajos científicos, en la crítica y en facilitar bibliografía relacionada.
Prácticas de laboratorio	Ayuda en las dificultades técnicas y metodológicas para el desarrollo de las prácticas.

Evaluación			
Metodoloxías	Competencias	Descrición	Calificación

Presentación oral	C4 C6 C10	Exposición de los resultados y análisis del trabajo experimental.	15
Sesión magistral	B3 B4	Discusión/intervención en clase.	5
Recensión bibliográfica	B5 B6 B7 C5	Análisis crítico, comprensión del trabajo científico. Discusión sobre alternativas de estudio, mejora de resultados, perspectivas de futuro, ..., que pongan de manifiesto la capacidad creativa e innovadora del alumno.	30
Prácticas de laboratorio	B1 B5 B6 B7 C3 C9 C11	Destreza, aptitudes mostradas en el laboratorio. Resultados obtenidos en la experimentación.	15
Prueba de ensayo/desarrollo	A1 A4 A7 A8 A20	Grado de asimilación y comprensión de los conceptos. Capacidad de síntesis y redacción.	30
Seminario	A9 A11 B2 C1	Participación en la discusión de los temas y desarrollo de las actividades teóricas, de las demostraciones experimentales, y la realización de ejercicios.	5

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 (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. Electrodes 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
Complementaria	- 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