



Guía Docente				
Datos Identificativos			2019/20	
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	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	Descritores: 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
A1	Coñecemento das realidades interdisciplinares da Química e do Medio Ambiente, dos temas punteiros nestas disciplinas e das perspectivas de futuro.
A4	Coñecer en profundidade as características e fundamentos de diversos modelos químicos para o estudo de sistemas orgánicos, inorgánicos e biolóxicos, incluídos os materiais con proxección tecnolóxica.
A7	Coñecer o marco teórico e as aplicacións da electroquímica e da fotocatalise 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.
B4	Que os estudantes saiban comunicar as súas conclusións e os coñecementos e razóns últimas que as sustentan a públicos especializados e non especializados dun modo claro e sen ambigüedades.
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.
B6	Ser capaz de analizar datos e situacións, xestionar a información dispoñible e sintetizala, todo iso a un nivel especializado.
B7	Ser capaz de planificar adecuadamente desenvolvementos experimentais, a un nivel especializado.
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.
C4	Expresarse correctamente, tanto de forma oral coma escrita, nas linguas oficiais da comunidade autónoma.



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 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 solubilidade, 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

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	B3 B4	13	13	26
Recensión bilbiográfica	B5 B6 B7 C5	1	10	11
Seminario	A9 A11 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 bilbiográfica	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.
Sesión maxistral	Axuda nas dificultades técnicas e metodolóxicas para o desenvolvemento das prácticas.
Recensión bilbiográfica	
Prácticas de laboratorio	
Proba de ensaio	
Seminario	

Avaliación			
Metodoloxías	Competencias	Descrición	Cualificación
Presentación oral	C4 C6 C10	Exposición dos resultados e análise das prácticas.	15
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	A9 A11 B2 C1	Participación na discusión dos temas e desenrolo das actividades teóricas, tipo demostracións, realización de exercicios.	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