



Guía Docente				
Datos Identificativos				2013/14
Asignatura (*)	Química Física Avanzada	Código	610G01020	
Titulación				
Descriptorios				
Ciclo	Período	Curso	Tipo	Créditos
Grao	1º cuatrimestre	Cuarto	Obrigatoria	6
Idioma	CastelánInglés			
Prerrequisitos				
Departamento	Química Física e Enxeñaría Química 1			
Coordinación	Iglesias Martinez, Emilia	Correo electrónico	emilia.iglesias@udc.es	
Profesorado	Brandariz Lendoiro, Maria Isabel Iglesias Martinez, Emilia	Correo electrónico	i.brandariz@udc.es emilia.iglesias@udc.es	
Web	campusvirtual.udc.es			
Descrición xeral	<p>DESCRIPTORIOS: Interacciones iónicas y moleculares Fenómenos de transporte. Ecuación de velocidad y mecanismos de reacción. Teorías cinetoquímicas. Catálisis homogénea. Introducción a la cinética electroquímica. Macromoléculas y coloides.</p> <p>DESCRIPCIÓN: Química Física Avanzada aborda el estudio fenomenológico de las interacciones entre iones y moléculas, las cuales permiten comprender la configuración de macromoléculas de interés químico y biológico. Los fenómenos de transporte en disolución hacen posible la caracterización de macromoléculas y son fundamentales en la aplicación de ciertas técnicas al estudio cinético de reacciones. La Cinética Química introduce la variable tiempo en el estudio de una reacción química, analizando los factores que modifican su velocidad con el fin de deducir la ecuación de velocidad para finalmente proponer un mecanismo de reacción que interprete a nivel molecular la reacción macroscópica observada.</p>			

Competencias da titulación	
Código	Competencias da titulación

Resultados da aprendizaxe			
Competencias de materia (Resultados de aprendizaxe)	Competencias da titulación		
<p>Metodológicas:</p> <ul style="list-style-type: none"> · Ser capaces de planificar, diseñar, y realizar experimentos relacionados con el transporte de materia y transporte de carga. · Ser capaces de plantear y diseñar el estudio cinético de una reacción química. · Aplicación de programas informáticos sencillos al análisis cuantitativo de datos cinéticos. · Interpretación de los resultados en base a un mecanismo de reacción. · Simulación / predicción de datos inéditos a partir de la ecuación de velocidad 	A19 A20 A22 A24	B3 B4	C8
<p>Conceptuales:</p> <ul style="list-style-type: none"> · Conocimiento de las interacciones interiónicas e inter- o intramoleculares y su relación fenómenos de asociación, autoagregación o conformación molecular. · Dominio de los métodos propios de la cinética química. Interpretación a nivel molecular (mecanicista) de las reacciones químicas. Comprender y conocer los factores que puedan modificar la velocidad de una reacción. · Entender el proceso de catálisis y su relación con la activación química, fotoquímica o electroquímica 	A1 A4 A10 A14	B3	
<p>Actitudinales:</p> <ul style="list-style-type: none"> · Presentar informes adecuados de un estudio experimental · Analizar y criticar estudios cinéticos publicados de dificultad baja. 		B1 B3	C6

Contidos	
Temas	Subtemas



Intercciones iónicas y moleculares	<ul style="list-style-type: none"> · Interacciones entre iones en disolución: coeficiente de actividad. Ley de Debye-Huckel. Fuerza iónica. · Interacciones entre moléculas. Momento dipolar. Polarizabilidad: ecuación de Clausius-Mossotti. Interacciones dipolares. Interacción hidrofóbica: autoagregación y conformación molecular. · Coloides: micelas directas e inversas, membranas biológicas. · Macromoléculas
Fenómenos de transporte	<ul style="list-style-type: none"> · Ecuaciones fenomenológicas. Flujo. Difusión. Ley de Fick. Ecuación de Stokes-Einstein. · Conductividad térmica · Conductividad eléctrica: Teoría de Deby-Huckel-Onsager. · Viscosidad
Rate equation and reaction mechanism	<ul style="list-style-type: none"> · Integrated rate law. Initial rates. The reaction order and reaction stoichiometry. Method of flooding. Use of physical properties in a kinetic study, · Complex reaction schemes: parallel and concurrent reactions, reversible or opposing reactions, consecutive reactions. · The steady-state approximation. · Reaction mechanisms: elementary reactions. deduction of reaction mechanisms.
Teorías cinetoquímicas y aplicaciones	<ul style="list-style-type: none"> · Teoría de colisiones: factor de frecuencias · Teoría del complejo activado: aproximación según la Termodinámica Estadística y según la Termodinámica clásica. Curvas de energía potencial · Reacciones en fase gas: mecanismo de Lindeman · Reacciones en disolución. Reacciones con control por difusión · Reacciones de transferencia electrónica · Reacciones fotoquímicas
Catálisis	<ul style="list-style-type: none"> · Catálisis homogénea, heterogénea y microheterogénea · Mecanismo general de catálisis: ecuaciones de velocidad · Catálisis homogénea: catálisis nucleófila, catálisis ácido-base · Correlaciones de energía libre · Catálisis microheterogénea: catálisis micelar; catálisis enzimática. Inhibición
Introducción a la cinética electroquímica	<ul style="list-style-type: none"> · Reacciones electroquímicas: aspectos singulares · Interfase electrodo-disolución: modelo de Gouy-Chapman · Velocidad de transferencia de carga. Ecuación de Butler-Volmer · Voltametría
Prácticas	<ul style="list-style-type: none"> · Experimentos de Laboratorio relacionados con fenómenos de transporte, determinación de ecuaciones de velocidad y procesos de catálisis.

Planificación

Metodoloxías / probas	Horas presenciais	Horas non presenciais / traballo autónomo	Horas totais
Sesión maxistral	21	31.5	52.5
Seminario	7	24.5	31.5
Prácticas de laboratorio	20	40	60
Proba obxectiva	4	0	4
Atención personalizada	2	0	2

*Os datos que aparecen na táboa de planificación son de carácter orientativo, considerando a heteroxeneidade do alumnado

Metodoloxías

Metodoloxías	Descrición
--------------	------------



Sesión maxistral	? En las clases expositivas se introducirán los conceptos, modelos, metodologías y teorías de los contenidos fundamentales del programa de la asignatura. A través del campus virtual, el alumno dispondrá con antelación de material que complementa la clase para su previo estudio y análisis. La lectura previa de los temas que se exponen en clase, sin duda, redundará en un mayor aprovechamiento y facilita la interacción alumno-profesor.
Seminario	? Seminarios: clarificación y consolidación de los contenidos teóricos mediante la resolución de cuestiones, problemas o la crítica de estudios prácticos. El desarrollo de los seminarios se basa en el trabajo y la participación activa del alumno, para lo cual dispondrá con antelación de la relación de ejercicios, cuestiones y/o casos en los que se trabajará en cada sesión de seminario.
Prácticas de laboratorio	? Se realizarán experimentos relacionados con los conceptos tratados en la asignatura. El alumno, con ayuda del profesor, tratará de reproducir sencillos experimentos de laboratorio. Cada alumno deberá elaborar un informe de cada práctica realizada, siguiendo las indicaciones del profesor, y la exposición de los resultados. Será necesaria la superación de las prácticas para la superación de la asignatura.
Proba obxectiva	? Resolución de cuestiones de teoría y de ejercicios en relación con los temas tratados en las clases de teoría, de seminario y en las prácticas de laboratorio. El alumno demostrará de forma independiente y en un intervalo de tiempo prefijado, los conocimientos adquiridos y su capacidad para la resolución de ejercicios y/o cuestiones conceptuales.

Atención personalizada

Metodoloxías	Descrición
Prácticas de laboratorio	<p>Previamente a la realización del trabajo experimental, el alumno realizará con ayuda del profesor, la interpretación del artículo científico que resume la experiencia que se pretende realizar. Durante la realización le asistirá en las complicaciones que surjan. Finalizada la práctica, el profesor ayudará al alumno en la interpretación de los resultados en base a modelos desarrollados en clase y en el Aula de Informática para el tratamiento cuantitativo de resultados.</p> <p>Se recomienda a los alumnos el uso de tutorías individualizadas para resolver todas las dudas, cuestiones y conceptos que no hayan quedado suficientemente claros, referentes, tanto al desarrollo de los contenidos de la materia en las sesiones magistrales, como en los seminarios.</p>

Avaliación

Metodoloxías	Descrición	Cualificación
Sesión maxistral	? Se incentiva la participación del alumno durante el desarrollo de esta actividad, mediante la formulación de preguntas que ayuden a clarificar los conceptos o mediante el planteamiento de enfoques alternativos.	5
Seminario	? Las sesiones de seminario se han de basar en el trabajo del alumno. Refuerzan y asientan los conceptos teóricos desarrollados en los diferentes temas. Sirven de discusión de las metodologías y procedimientos aplicados en cada caso.	5
Prácticas de laboratorio	? Reflejan la destreza y capacidad del alumno en la planificación, diseño y desarrollo de experimentos sencillos. Ensayo de diferentes técnicas en la caracterización de sistemas o en el seguimiento de procesos de reacción. Tratamiento cuantitativo de los resultados experimentales siguiendo los modelos introducidos en el Aula de Informática. Explicación de los resultados en base a modelos teóricos.	30
Proba obxectiva	? Realización de examen escrito de cuestiones teóricas y prácticas en referencia a los contenidos de las sesiones magistrales, los seminarios y las prácticas. Se requiere superar el 45% de los contenidos para aplicar los porcentajes de las otras actividades, así como, haber asistido con regularidad al desarrollo de las mismas. ? La superación de las prácticas es requisito imprescindible para superar la asignatura. ? La calificación obtenida en todas las actividades, con la excepción de la obtenida en el examen, se mantendrá en las restantes convocatorias del curso académico. ? El alumn@ obtendrá la calificación de No Presentado cuando no se presente al examen oficial (programación de la Facultad)	60

