



Guía Docente

Datos Identificativos					2013/14
Asignatura (*)	Química Física Avanzada	Código	610G01020		
Titulación	Grao en Química				
Descritores					
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>DESCRIPTORES: 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
A1	Utilizar a terminoloxía química, nomenclatura, convenios e unidades.
A4	Coñecer os tipos principais de reacción química e as súas principais características asociadas.
A10	Coñecer a cinética do cambio químico, incluíndo a catálise e os mecanismos de reacción.
A14	Demostrar o coñecemento e comprensión de conceptos, principios e teorías relacionadas coa Química.
A19	Levar a cabo procedementos estándares e manexar a instrumentación científica.
A20	Interpretar os datos procedentes de observacións e medidas no laboratorio.
A22	Planificar, deseñar e desenvolver proxectos e experimentos.
A24	Explicar, de xeito comprensible, fenómenos e procesos relacionados coa Química.
B1	Aprender a aprender.
B3	Aplicar un pensamento crítico, lóxico e creativo.
B4	Traballar de forma autónoma con iniciativa.
C6	Valorar criticamente o coñecemento, a tecnoloxía e a información dispoñible para resolver os problemas cos que deben enfrontarse.
C8	Valorar a importancia que ten a investigación, a innovación e o desenvolvemento tecnolóxico no avance socioeconómico e cultural da sociedade.

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	· 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	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. 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.

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

Observacións avaliación

Fontes de información

Bibliografía básica	<ul style="list-style-type: none"> - P. W. Atkins, J. de Paula (2008). Química Física, 8ª Ed. . Panamericana - Laidler K. J. (1994). Chemical Kinetics . Harper and Row, New York. - Espenson J. H. (1995). Chemical kinetics and reaction mechanisms 2ª ed.. McGraw-Hill, New York. - Bockris, J.O.M., Reddy, A K.N. (1998). Modern Electrochemistry 1. Ionics. 2nd ed.. Plenum Press, New York
Bibliografía complementaria	<ul style="list-style-type: none"> - LEVINE I. N. (2004). Fisicoquímica 5ª ed.. McGraw-Hill, Madrid - R. A. Jackson (2004). Mechanism in Organic Reactions.. Royal Society of Chemistry (RSC) - P. L. Brezonik (1994). Chemical Kinetics and Process Dynamic in Aquatic Systems.. Lewis Publishers - P. Sanz Pedredo (1992). Fisicoquímica para Farmacia y Biología.. Masson-Salvat Medicina - S. R. Logan (2000). Fundamentos de Cinética Química. Addison Wesley - BOCKRIS, J.O.M., REDDY, A.K.N., GAMBOA-ADELCO, M.E. (2000). Modern Electrochemistry 2A. Fundamentals of Electrodeics.. Kluwer Academic/Plenum Press: New York - BERRY R. S., RICE S. A., ROSS J. (2000). Physical Chemistry. 2ª ed.. Oxford University Press, New York - KORITA, J, DVORAK, J., KAVAN, L. (1987). Principles of Electrochemistry. 2nd ed.. Wiley, Chichester - J. BERTRAN-RUSCA, J. NUÑEZ-DELGADO Eds , (2002). Química Física, vol. II. Ariel Ciencia

Recomendacións

Materias que se recomienda ter cursado previamente

Materias que se recomienda cursar simultaneamente

Materias que continúan o temario



Química 1/610G01007

Química 2/610G01008

Química 3/610G01009

Química 4/610G01010

Química Física 1/610G01016

Química Física 2/610G01017

Química Física 3/610G01018

Experimentación en Química Física/610G01019

Observacións

Prerrequisitos: - Son necesarios los conocimientos de las asignaturas de Química y de Química física -Saber redactar, sintetizar y presentar ordenadamente un trabajo.

- Dominar la representación gráfica, regresión lineal con conocimientos básicos de estadística.

- Utilizar a nivel de usuario herramientas básicas de informática: Excel, Word, Power Point.

- Se recomienda conocer ingles con nivel medio de comprensión de lectura.

(*)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