



Guía Docente				
Datos Identificativos			2014/15	
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 Martínez, Emilia	Correo electrónico	emilia.iglesias@udc.es	
Profesorado	Iglesias Martínez, Emilia	Correo electrónico	emilia.iglesias@udc.es	
Web	campusvirtual.udc.es			
Descrición xeral	<p><b>PALABRAS CLAVE:</b> interaccións iónicas e fenómenos de transporte molecular. Ecuación de velocidade e mecanismos de reacción. Teorías Cinetoquímicas. Catálise homoxénea. Introducción á cinética eletroquímica. Macromoléculas e colóides.</p> <p><b>DESCRIPTORES:</b> 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><b>KEY WORDS:</b> ionic interactions and molecular transport phenomena. Rate equation and reaction mechanisms. Chemical Kinetic Theories. Homogeneous catalysis. Introduction to electrochemical kinetics. Macromolecules and colloids.</p> <p><b>DESCRIPCIÓN:</b> A Química Física Avanzada aborda o estudo fenomenolóxico das interaccións entre ións e moléculas, que nos permiten comprender a configuración de macromoléculas de interese químico e biolóxico. Os fenómenos de transporte en solución fan posible a caracterización de macromoléculas e son fundamentais para a aplicación de determinadas técnicas para estudo da cinética das reaccións. A Cinética Química introduce a variable tempo no estudo dunha reacción química, analiza os factores que modifican a súa velocidade, a fin de deducir a ecuación de velocidade para finalmente propor un mecanismo de reacción a nivel molecular para interpretar a reacción macroscópico.</p> <p><b>DESCRIPCIÓN:</b> 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> <p><b>DESCRIPTION:</b> Advanced Physical Chemistry addresses the phenomenological study of the interactions between ions and molecules, which allow us to understand the configuration of macromolecules of chemical and biological interest. Transport phenomena in solution makes possible the characterization of macromolecules and are central to the application of certain techniques to kinetic study of reactions. Chemical kinetics introduces the time variable in the study of a chemical reaction, analyzing the factors that modify reaction rate in order to determine the rate equation, and finally to propose a reaction mechanism at the molecular level to interpret the observed macroscopic reaction.</p>			

Competencias da titulación	
Código	Competencias da titulación
A1	Utilizar a terminoloxía química, nomenclatura, convenios e unidades.



A3	Coñecer as características dos diferentes estados da materia e as teorías empregadas para describilos.
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.
A23	Desenvolver unha actitude crítica de perfeccionamento na labor experimental.
A25	Relacionar a Química con outras disciplinas e recoñecer e valorar os procesos químicos na vida diaria.
B1	Aprender a aprender.
B3	Aplicar un pensamento crítico, lóxico e creativo.
B4	Traballar de forma autónoma con iniciativa.
C3	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.
C6	Valorar criticamente o coñecemento, a tecnoloxía e a información dispoñible para resolver os problemas cos que deben enfrontarse.

### Resultados da aprendizaxe

Competencias de materia (Resultados de aprendizaxe)	Competencias da titulación		
<b>Metodolóxicas:</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>· Ser capaz de planificar, proxectar e realizar experimentos relacionados co transporte de materia e de carga.</li> <li>· Ser capaz de propoñer e elaborar un estudo cinético dunha reacción química.</li> <li>· Aplicación de programs informáticos sinxelos para o análise cuantitativo dos datos cinéticos.</li> <li>· Interpretación dos resultados en base a un mecanismo de reacción.</li> <li>· Simulación / predicción de datos non publicados partindo da ecuación de velocidade.</li> </ul>	A3 A19 A20 A22 A23	B3	C3
<b>Conceptual:</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>· Coñecemento das interaccións interiónicas e inter- ou intramoleculares e a súa relación cos fenómenos de asociación, auto-agregación ou conformación molecular.</li> <li>· Manexar os métodos propios da cinética química. Interpretación a nivel molecular (mecanicista) das reaccións químicas.</li> </ul> <b>Entender e coñecer os factores que poden modificar a velocidade dunha reacción.</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>· Comprender o proceso de catálise e súa relación coa activación química, fotoquímica ou electroquímica.</li> </ul>	A1 A4 A10 A14	B3	
<b>Actitudinales:</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>· Presentar informes axeitados dun estudo experimental</li> <li>· Analizar e criticar estudos cinéticos publicados de dificultade baixa.</li> </ul>	A23 A25	B1 B3 B4	C3 C6

### Contidos

Temas	Subtemas
Interaccións iónicas e moleculares	<ul style="list-style-type: none"> <li>· Interaccións entre ións en disolución: coeficiente de actividade. Lei de Debye-Hückel. Forza iónica.</li> <li>· As interaccións entre as moléculas. Momento dipolar. Polarizabilidade: Clausius-Mossotti. Interaccións dipolares. Interacción hidrofóbica: autoagregación e conformación molecular.</li> <li>· Colóides: micelas directa e inversa, membranas biolóxicas.</li> <li>· Macromoléculas</li> </ul>
Fenómenos de transporte	<ul style="list-style-type: none"> <li>· Ecuacións fenomenolóxicas. Fluxo. Difusión. Lei de Fick. Ecuación de Stokes-Einstein.</li> <li>· Conductividade térmica</li> <li>· Conductividade eléctrica: Teoría de Debye-Huckel-Onsager.</li> <li>· Viscosidade</li> </ul>



Ecuación de velocidade e mecanismo de reacción	<ul style="list-style-type: none"> <li>· Ecuación integrada de velocidade. Velocidades iniciais. Orden de reacción e estequiometría. Método de aillamento. O uso das propiedades físicas no seguimento cinético dunha reacción química.</li> <li>· Esquemas complexos de reacción: reaccións paralelas, reaccións reversibles, reaccións consecutivas.</li> <li>· Aproximación do estado estacionario.</li> <li>· Mecanismos de reacción, reacción elemental. deducción de mecanismos de reaction.</li> </ul>
Teorías cinetoquímicas e aplicaciónes	<ul style="list-style-type: none"> <li>· Teoría de colisións: factor de frecuencias</li> <li>· Teoría do complexo activado: aproximación según a Termodinámica Estadística e según la Termodinámica clásica. Curvas de enerxía potencial</li> <li>· Reaccións en fase gas: mecanismo de Lindeman</li> <li>· Reaccións en disolución. Reaccións controladas pola difusión dos reactivos.</li> <li>· Reaccións de transferencia electrónica</li> <li>· Reaccións fotoquímicas</li> </ul>
Catálise	<ul style="list-style-type: none"> <li>· Catálise homoxénea, heteroxénea e microheteroxénea</li> <li>· Mecanismo xeral de catálise: ecuacións de velocidade</li> <li>· Catálise homoxénea: catálise nucleófila, catálise ácido-base</li> <li>· Correlacións de enerxía libre</li> <li>· Catálise microheteroxénea: catálise micelar; catálise enzimática. Inhibición</li> </ul>
Introducción a cinética electroquímica	<ul style="list-style-type: none"> <li>· Reaccións electroquímicas: aspectos singulares</li> <li>· Interfase electrodo-disolución: modelo de Gouy-Chapman</li> <li>· Velocidade de transferencia de carga. Ecuación de Butler-Volmer</li> <li>· Voltametría</li> </ul>
Prácticas	<ul style="list-style-type: none"> <li>· Experimentos de Laboratorio relacionados con fenómenos de transporte, determinación de ecuacións de velocidade e procesos de catálise.</li> </ul>

## Planificación

Metodoloxías / probas	Horas presenciais	Horas non presenciais / traballo autónomo	Horas totais
Sesión maxistral	21	42	63
Seminario	7	14	21
Prácticas de laboratorio	20	40	60
Proba mixta	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	? Nas clases de exposición serán introducidos os conceptos, modelos, métodos e teorías dos contidos fundamentais do programa do curso. A través do campus virtual, o alumno disporá con antelación o material que complementa a clase, para exame previo e análise. A lectura previa dos temas discutidos na clase, sen dúbida, leva a unha mellor utilización e facilita a interacción alumno-profesor.
Seminario	? Seminarios: aclaración e consolidación do contido teórico por medio da resolución de cuestións, problemas ou crítica de estudos prácticos. O desenvolvemento dos seminarios baséase no traballo e participación activa dos alumnos, por elo, a relación de exercicios, preguntas e / ou casos que han traballar en cada sesión de seminario estará dispoñible con antelación.



Prácticas de laboratorio	? Faranse experimentos relacionados cos conceptos abordados no curso . O alumno, coa axuda do profesor, tentará de reproducir experimentos de laboratorio sinxelos. Cada alumno elaborará un informe sobre cada práctica, segundo a orientación do profesor, e /ou a exposición /discusión dos resultados. Será necesario superar as prácticas laboratorio para aprobar a asignatura.
Proba mixta	? Resolución de cuestións de teoría e exercicios relacionados cos temas abordados nas clases expositivas, nas prácticas de laboratorio ou seminarios. O alumno debe demostrar de forma independente e nun intervalo de tempo predefinido, o coñecemento adquirido e a capacidade de resolver ejercicios e / ou cuestións conceptuais.

## Atención personalizada

Metodoloxías	Descrición
Prácticas de laboratorio	<p>Antes de realizar o traballo experimental, o alumno fará, coa axuda do profesor, a interpretación do artigo científico que resume a experiencia que vai reproducir. Durante o desenrolo do experimente será asesorado nas complicacións que poidan xurdir. Finalizada a mesma, o profesor guiará o alumno na interpretación dos resultados en base os modelos cuantitativos desenvolvidos na clase e na sala de informática para o tratamento cuantitativo dos resultados.</p> <p>Recoméndase o uso das titorías individuais para a súa orientación na resolución das dúbidas, cuestións e conceptos que non quedaron suficientemente claros, tanto no que se refire o desenvolvemento dos contidos teóricos como dos seminarios.</p>

## Avaliación

Metodoloxías	Descrición	Cualificación
Sesión maxistral	<p>? A participación do alumno durante o desenvolvemento desta actividade, facendo preguntas que axudan a aclarar conceptos ou plantexando enfoques alternativas é incentivada.</p> <p>? Os competencias da titulación avaliadas nesta metodoloxía inclúen as codificadas como B1, B3 e C8.</p>	5
Seminario	<p>? As sesións de seminario basearase no traballo do alumno. Fortalecen e establecen os conceptos teóricos desenvolvidos nas distintas disciplinas. Serven para o debate sobre as metodoloxías e procedementos aplicados en cada caso.</p> <p>? Serán avaliadas as competencias B1, B3 e C6 no desenvolvemento das actividades dos seminarios.</p>	10
Prácticas de laboratorio	<p>? Reflicten a destreza e capacidade do alumno na planificación, deseño e desenvolvemento de experimentos sinxelos. Ensaio de distintas técnicas para caracterizar os diferentes sistemas ou procesos no seguimento dunha reacción química. Tratamento cuantitativo dos resultados experimentais según os modelos introducidos na sala de informática. Explicación dos resultados en base a modelos teóricos.</p> <p>? Na condución das prácticas de laboratorio os alumnos serán avaliados nas competencias A19, A20, A22, A23, A24, A25, B4, B7 e C3.</p>	30
Proba mixta	<p>? A realización da proba escrita consta de cuestións teóricas e prácticas derivadas dos contidos teóricos do curso, dos seminarios e das prácticas. É necesario superar o 45% das cuestións para engadir os porcentexes das outras actividades, así como haber aistido regularmente as clases de exposición.</p> <p>? A superación das prácticas é esencial na superación da asignatura.</p> <p>? As puntuacións obtidas en todas as actividades, con excepción da do exame, manteráanse nas restantes convocatorias do curso académico.</p> <p>? O alumno obterá a cualificación de Non Presentado cando non se presentase exame oficial (Programación da Facultade)</p> <p>? As competencias da titulación que son avaliadas na proba obxectiva centráanse principalmente nas codificadas como A1, A3, A4, A10, A14 e B3.</p>	55



## Observacións avaliación

### Fontes de información

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

### Recomendacións

#### Materias que se recomenda ter cursado previamente

#### Materias que se recomenda 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 os coñecementos das asignaturas de:  
Química e de Química física
- Saber redactar, sintetizar e presentar ordeadamente un traballo.
- Dominar a representación gráfica, regresión lineal con coñecementos básicos de estadística.
- Utilizar a nivel de usuario ferramentas básicas de informática: Excel, Word, Power Point.
- Se recomenda 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