



Guía docente				
Datos Identificativos				2015/16
Asignatura (*)	Química Física Avanzada	Código	610G01020	
Titulación	Grao en Química			
Descriptorios				
Ciclo	Periodo	Curso	Tipo	Créditos
Grado	1º cuatrimestre	Cuarto	Obligatoria	6
Idioma	CastellanoInglés			
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, María Isabel	Correo electrónico	i.brandariz@udc.es	
	Iglesias Martinez, Emilia		emilia.iglesias@udc.es	
Web	campusvirtual.udc.es			
Descripción general	<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 del título	
Código	Competencias del título
A1	Utilizar la terminología química, nomenclatura, convenios y unidades.
A3	Conocer las características de los diferentes estados de la materia y las teorías empleadas para describirlos.
A4	Conocer los tipos principales de reacción química y sus principales características asociadas.
A10	Conocer la cinética del cambio químico, incluyendo la catálisis y los mecanismos de reacción.
A14	Demostrar el conocimiento y comprensión de conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química.
A19	Llevar a cabo procedimientos estándares y manejar la instrumentación científica.
A20	Interpretar los datos procedentes de observaciones y medidas en el laboratorio.
A22	Planificar, diseñar y desarrollar proyectos y experimentos.
A23	Desarrollar una actitud crítica de perfeccionamiento en la labor experimental.
A25	Relacionar la Química con otras disciplinas y reconocer y valorar los procesos químicos en la vida diaria.
A27	Impartir docencia en química y materias afines en los distintos niveles educativos.
B1	Aprender a aprender.
B3	Aplicar un pensamiento crítico, lógico y creativo.
B4	Trabajar de forma autónoma con iniciativa.
C3	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.
C6	Valorar críticamente el conocimiento, la tecnología y la información disponible para resolver los problemas con los que deben enfrentarse.

Resultados de aprendizaje	
Resultados de aprendizaje	Competencias del título



<p>Metodológicas:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>· Ser capaces de planificar, diseñar, y realizar experimentos relacionados con el transporte de materia y transporte de carga.</li> <li>· Ser capaces de plantear y diseñar el estudio cinético de una reacción química.</li> <li>· Aplicación de programas informáticos sencillos al análisis cuantitativo de datos cinéticos.</li> <li>· Interpretación de los resultados en base a un mecanismo de reacción.</li> <li>· Simulación / predicción de datos inéditos a partir de la ecuación de velocidad</li> </ul>	A3 A19 A20 A22 A23 A27	B3	C3
<p>Conceptual:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>· Conocimiento de las interacciones intermoleculares e inter- o intramoleculares y su relación con los fenómenos de asociación, auto-agregación o conformación molecular.</li> <li>· Manejar los métodos propios de la cinética química. Interpretación a nivel molecular (mecanicista) de las reacciones químicas. Entender y conocer los factores que pueden modificar la velocidad de las reacciones químicas.</li> <li>· Comprender el proceso de catálisis y su relación con la activación química, fotoquímica y electroquímica.</li> </ul>	A1 A4 A10 A14	B3	
<p>Actitudinales:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>· Presentar informes adecuados de un estudio cinético experimental</li> <li>· Analizar y criticar estudios cinéticos publicados de dificultad baja.</li> </ul>	A23 A25 A27	B1 B3 B4	C3 C6

Contenidos	
Tema	Subtema
Interacciones iónicas y moleculares	<ul style="list-style-type: none"> <li>· Interacciones entre iones en disolución: coeficiente de actividad. Lei de Debye-Hückel. Fuerza iónica.</li> <li>· Interacciones intermoleculares. Momento dipolar. Polarizabilidad: Clausius-Mossotti. Interacciones dipolares. Interacción hidrofóbica: autoagregación y conformación molecular.</li> <li>· Coloides: micelas directa e inversas, membranas biológicas.</li> <li>· Macromoléculas</li> </ul>
Fenómenos de transporte	<ul style="list-style-type: none"> <li>· Ecuaciones fenomenológicas. Flujo. Difusión. Ley de Fick. Ecuación de Stokes-Einstein.</li> <li>· Conductividad térmica</li> <li>· Conductividad eléctrica: Teoría de Debye-Huckel-Onsager.</li> <li>· Viscosidad</li> </ul>
Ecuación de velocidad y Mecanismos de reacción	<ul style="list-style-type: none"> <li>· Ecuaciones integradas de velocidad. Método de velocidades iniciales. Orden de reacción y constante de velocidad. Reacción estequiométrica. Método de aislamiento. Relación entre concentración y propiedad física. Técnicas experimentales</li> <li>· Esquemas de reacción complejos: reacciones paralelas, reversibles y consecutivas.</li> <li>· Aproximación del estado estacionario.</li> <li>· Mecanismos de reacción: reacción elemental. Deducción de mecanismos de reacción</li> </ul>
Teorías cinetoquímicas y aplicaciones	<ul style="list-style-type: none"> <li>· Teoría de colisiones: factor de frecuencias</li> <li>· Teoría del complejo activado: aproximación según la Termodinámica Estadística y según la Termodinámica clásica. Curvas de energía potencial</li> <li>· Reacciones en fase gas: mecanismo de Lindeman</li> <li>· Reacciones en disolución. Reacciones con control por difusión.</li> <li>· Reacciones de transferencia electrónica</li> <li>· Reacciones fotoquímicas</li> </ul>



Catálisis	<ul style="list-style-type: none"> <li>· Catálisis homogénea, heterogénea y microheterogénea</li> <li>· Mecanismo general de catálisis: ecuaciones de velocidad</li> <li>· Catálisis homogénea: catálisis nucleófila, catálisis ácido-base</li> <li>· Correlaciones de energía libre: ecuación de Swain-Scott, ley de Bronsted, correlaciones de Hammett, correlaciones de Taft</li> <li>· Catálisis microheterogénea: catálisis micelar; catálisis enzimática. Inhibición</li> </ul>
Introducción a la cinética electroquímica	<ul style="list-style-type: none"> <li>· Reacciones electroquímicas: aspectos singulares</li> <li>· Interfase electrodo-disolución: modelo de Gouy-Chapman</li> <li>· Velocidad 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 ecuaciones de velocidad e procesos de catálisis.</li> </ul>

Planificación				
Metodologías / pruebas	Competencias	Horas presenciales	Horas no presenciales / trabajo autónomo	Horas totales
Sesión magistral	A25 A27 B3	21	42	63
Seminario	A27 B1 C6	7	14	21
Prácticas de laboratorio	A19 A20 A22 A23 A27 B1 B4 C3	20	40	60
Prueba mixta	A1 A3 A4 A10 A14 A20	4	0	4
Atención personalizada		2	0	2

(\*) Los datos que aparecen en la tabla de planificación són de carácter orientativo, considerando la heterogeneidad de los alumnos

Metodologías	
Metodologías	Descripción
Sesión magistral	? En las clases de exposición se introducirán los conceptos, modelos, métodos y teorías de los contenidos fundamentales del programa de la asignatura. A través del campus virtual, el alumno dispondrá con antelación del material que complementa la clase, para su examen previo y análisis. La lectura previa de los temas discutidos en clase, sin duda, redundará en un mejor rendimiento y facilita la interacción alumno-profesor.
Seminario	? Seminarios: aclaran y consolidan los contenidos teóricos mediante la resolución de cuestiones, problemas y la crítica de estudios prácticos. El desarrollo de los seminarios se basa en el trabajo personal y en la participación activa del alumno. Por ello, la relación de ejercicios, preguntas y/o casos que se van a trabajar en cada sesión de seminario estará disponible en el Aula virtual con antelación.
Prácticas de laboratorio	? Se realizarán experimentos relacionados con los conceptos abordados durante el curso. El alumno, con ayuda del profesor, intentará reproducir experimentos de laboratorio sencillos. Cada alumno elaborará un informe sobre cada práctica, siguiendo las orientaciones del profesor, Y/o la exposición / discusión de los resultados. Será necesario superar las prácticas de laboratorio para aprobar la asignatura.
Prueba mixta	? Resolución de cuestiones de teoría y ejercicios relacionados con los temas abordados en las clases expositivas, en las prácticas de laboratorio y en los seminarios. El alumno debe demostrar de forma independiente y en un período de tiempo predefinido, los conocimientos adquiridos y la capacidad de resolver ejercicios y/o cuestiones conceptuales, así como la crítica de sus resultados.

Atención personalizada	
Metodologías	Descripción



Prácticas de laboratorio	<p>Antes de realizar el trabajo experimental, el alumno deberá abordar, con ayuda del profesor, la interpretación del artículo científico que resume la experiencia que va a reproducir y, en base a este trabajo, diseñar su experimento. Durante el desarrollo del mismo será asesorado en las complicaciones que puedan surgir. Finalizada la misma, el profesor guiará al alumno en la interpretación de los resultados en base a los modelos cuantitativos expuestos en clase y en el Aula de informática para el tratamiento cuantitativo de los resultados.</p> <p>Se recomienda el uso de las tutorías individuales para la orientación en la resolución de las dudas, cuestiones y aclarar conceptos que no se comprendieron suficientemente, tanto en lo que se refiere al desarrollo de los contenidos teóricos como de los seminarios.</p>
--------------------------	--

Evaluación			
Metodologías	Competencias	Descripción	Calificación
Sesión magistral	A25 A27 B3	? 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.	0
Seminario	A27 B1 C6	? Las sesiones de seminario se han de basar en el trabajo del alumno, que encontrará en esta actividad el marco adecuado para exponer su manera de entender la asignatura. Refuerzan y asientan los conceptos teóricos desarrollados en los diferentes temas mediante el planteamiento y resolución de ejercicios y cuestiones. Sirven de discusión de las metodologías y procedimientos aplicados en cada caso. ?La evaluación de esta actividad se hará en base al trabajo personal del alumno en las sesiones de seminario.	20
Prácticas de laboratorio	A19 A20 A22 A23 A27 B1 B4 C3	? 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 y explicación de los mismos en base a modelos teóricos. ? Se requiere la presentación de un informe de laboratorio que refleje los conceptos anteriores. ? En la evaluación de esta actividad se tiene en cuenta el trabajo de laboratorio, los resultados obtenidos y el Informe elaborado.	25
Prueba mixta	A1 A3 A4 A10 A14 A20	? Prueba escrita para responder a cuestiones teóricas y ejercicios relacionados con los contenidos de las sesiones magistrales, los seminarios y las prácticas. ? Se requiere aprobar cada una de las partes para aprobar la asignatura. La calificación obtenida en una actividad superada se mantendrá en las restantes convocatorias del curso académico. ? De no superar la asignatura, la calificación que figure en el Acta será la correspondiente a la media de las actividades no superadas. ? La máxima calificación alcanzable no depende de la convocatoria en la que se supere la asignatura. ? El alumno obtendrá la calificación de No Presentado cuando no se presente al examen oficial (programación de la Facultad).	55

Observaciones evaluación
--------------------------

Fuentes de información
------------------------



<b>Básica</b>	<ul style="list-style-type: none"><li>- P. W. Atkins, J. de Paula (2008). Química Física, 8ª Ed. . Panamericana</li><li>- Espenson J. H. (1995). Chemical kinetics and reaction mechanisms 2ª ed.. McGraw-Hill, New York.</li><li>- Laidler K. J. (1994). Chemical Kinetics . Harper and Row, 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>Complementaria</b>	<ul style="list-style-type: none"><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>- R. A. Jackson (2004). Mechanism in Organic Reactions.. Royal Society of Chemistry (RSC)</li><li>- LEVINE I. N. (2004). Físicoquímica 5ª ed.. McGraw-Hill, Madrid</li><li>- KORITA, J, DVORAK, J., KAVAN, L. (1987). Principles of Electrochemistry. 2nd ed.. Wiley, Chichester</li><li>- BERRY R. S., RICE S. A., ROSS J. (2000). Physical Chemistry. 2ª ed.. Oxford University Press, New York</li><li>- J. BERTRAN-RUSCA, J. NUÑEZ-DELGADO Eds , (2002). Química Física, vol. II. Ariel Ciencia</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 Electrochemicals.. Kluwer Academic/Plenum Press: New York</li></ul>

## Recomendaciones

### Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente

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

### Asignaturas que se recomienda cursar simultáneamente

### Asignaturas que continúan el temario

### Otros comentarios

- 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.

(\*) 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