



## Teaching Guide

Identifying Data					2016/17
Subject (*)	Química Física Avanzada	Code	610311501		
Study programme	Licenciado en Química				
Descriptors					
Cycle	Period	Year	Type	Credits	
First and Second Cycle	Yearly	Fifth	Troncal	8	
Language	Spanish				
Teaching method	Face-to-face				
Prerequisites					
Department	Química Física e Enxeñaría Química 1				
Coordinador		E-mail			
Lecturers		E-mail			
Web					
General description	<p>Asignatura troncal del último curso de la titulación. Forma parte del bloque formativo de Química Física constituido por cuatro asignaturas troncales (dos de laboratorio), dos obligatorias y varias optativas.</p> <p>Se espera que el alumno posea ya los conocimientos generales desarrollados en las materias de Física, Química Física, Introducción a la Espectroscopia y Cinetoquímica.</p> <p>Por tratarse de una materia de último curso, la formación del alumno implica/supone un doble propósito:</p> <ul style="list-style-type: none"><li>- Completar la formación en conocimientos químico físicos todavía no adquiridos, tales como los fenómenos de superficie y de transporte. Se completan así los contenidos teóricos troncales de Química Física en la titulación.</li><li>- Profundizar en ciertos contenidos ya desarrollados en cursos anteriores, tales como la Cinética y la Electroquímica, con objeto de que el alumno tenga una idea más clara de su aplicabilidad tanto en la industria como en la adquisición de nuevos conocimientos más específicos.</li></ul>				

## Study programme competences

Code	Study programme competences
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.
A5	Comprender os principios da termodinámica e as súas aplicacións en Química.
A10	Coñecer a cinética do cambio químico, incluíndo a catálise e os mecanismos de reacción.
A12	Relacionar as propiedades macroscópicas coas de átomos e moléculas.
A14	Demostrar o coñecemento e comprensión de conceptos, principios e teorías relacionadas coa Química.
A15	Recoñecer e analizar novos problemas e planear estratexias para solucionarlos.
A16	Adquirir, avaliar e utilizar os datos e información bibliográfica e técnica relacionada coa Química.
A20	Interpretar os datos procedentes de observacións e medidas no laboratorio.
A21	Comprender os aspectos cualitativos e cuantitativos dos problemas químicos.
A24	Explicar, de xeito comprensible, fenómenos e procesos relacionados coa Química.
A25	Relacionar a Química con outras disciplinas e recoñecer e valorar os procesos químicos na vida diaria.
B1	Aprender a aprender.
B2	Resolver problemas de forma efectiva.
B3	Aplicar un pensamento crítico, lóxico e creativo.
B4	Traballar de forma autónoma con iniciativa.
C1	Expresarse correctamente, tanto de forma oral coma escrita, nas linguas oficiais da comunidade autónoma.
C6	Valorar criticamente o coñecemento, a tecnoloxía e a información dispoñible para resolver os problemas cos que deben afrontarse.
C8	Valorar a importancia que ten a investigación, a innovación e o desenvolvemento tecnolóxico no avance socioeconómico e cultural da sociedade.

## Learning outcomes



Learning outcomes	Study programme competences		
Entender las ecuaciones matemáticas que gobiernan los fenómenos bajo estudio, así como manejarlas haciendo uso de los distintos sistemas de unidades.	A1 A15 A16 A20 A21 A24 A25	B1 B2 B3 B4	C1 C6 C8
Comprender a nivel microscópico los fenómenos de transporte.	A1 A12 A24	B1 B2 B3 B4	C1
Profundizar en el estudio de las interacciones iónicas en disolución.	A1 A12 A24	B1 B2 B3 B4	C1
Conocer los métodos experimentales que permiten la obtención de magnitudes moleculares, en particular, aquellos en los que la interacción de la radiación electromagnética con la materia se produce sin absorción de energía (métodos eléctricos y magnéticos, métodos de difracción).	A1 A3 A12	B1 B2 B3 B4	C1
Conocer los fundamentos de la transferencia de carga a través de un electrodo y la influencia del potencial sobre la velocidad de la misma.	A1 A5 A20 A21 A24 A25	B1 B2 B3	C6 C8
Adquirir los conocimientos teóricos y experimentales para abordar los fenómenos de superficie.	A1 A5 A14 A15 A16 A21 A24 A25	B1 B2 B3	C6 C8
Adquirir los conocimientos teóricos y experimentales necesarios para enjuiciar los cambios asociados a las reacciones químicas heterogéneas.	A4 A10 A14 A15 A20 A21 A24 A25	B1 B2 B3	C6 C8
Familiarizarse con los conceptos básicos necesarios para el estudio de las propiedades y la caracterización de los procesos interfaciales electroquímicos.	A1 A5 A14 A20 A21 A24 A25	B1 B2 B3	C6 C8



Contents	
Topic	Sub-topic
1. Físicoquímica de superficies: estudio termodinámico de la interfase.	1.1. Región interfacial o interfase. 1.2. Tensión superficial. 1.3. Interfases curvas. - Ecuación de Young-Laplace. - Presión de vapor en superficies curvas: ecuación de Kelvin. - Capilaridad. 1.4. Termodinámica de superficies en sistemas multicomponente: Isoterma de adsorción de Gibbs. 1.5. Monocapas.
2. Superficies sólidas: adsorción y catálisis heterogénea.	2.1. Adsorción de gases sobre sólidos. 2.2. Fisisorción y Quimisorción. 2.3. Isotermas de adsorción: clasificación. 2.4. Isoterma de Langmuir. 2.5. Isoterma BET. 2.6. Otras isotermas. 2.7. Catálisis heterogénea.
3. Interfases electrizadas.	3.1. Introducción. 3.2. Termodinámica de la interfase electrizada. Ecuación electrocapilar. 3.3. Estructura de la interfase - Modelo de Helmholtz-Perrin o de la doble capa rígida. - Modelo de Gouy-Chapman o de la doble capa difusa. - Modelo de Stern-Grahame. 3.4. Doble capa y coloides. 3.5. Cinética electroquímica.
4. Interacciones iónicas en disolución.	4.0. Introducción. 4.1. Interacciones ión-disolvente. - Comentarios sobre la estructura del agua. - Interacciones ión-disolvente. - Ecuación de Born. - Efectos de la hidratación. 4.2. Interacciones ión-ión. - Teoría de Debye-Hückel. - La nube iónica. - Coeficiente de actividad de un ión. - El parámetro de tamaño. - Coeficiente de actividad iónico medio. - La ley límite. - El comportamiento experimental.
5. Procesos de transporte en disoluciones electrolíticas: conductividad iónica.	5.1. Conducción y conductividad eléctrica. 5.2. Conductividad molar. 5.3. Movilidades iónicas. 5.4. Teoría de Debye-Hückel-Onsager. 5.5. Aplicaciones de las medidas de conductividad.



6. Propiedades eléctricas de la materia.	6.0. Introducción. 6.1. Desarrollo multipolar del potencial escalar. 6.2. Interacción de un campo eléctrico estático con un dieléctrico. - Moléculas no polares: polarización por distorsión. Ecuación de Clausius-Mossotti. - Moléculas con momento bipolar permanente: polarización por orientación. Ecuación de Debye. 6.3. Determinación de momentos bipolares y polarizabilidades. - Índice de refracción y polarización. - Medida del momento bipolar permanente a partir de la constante dieléctrica. 6.4. Aplicación de la medida de momentos bipolares.
7. Difracción de Rayos-X, electrones y neutrones.	7.1. La celda unidad y la estructura cristalina. 7.2. Estructuras cristalinas en distintos tipos de sólidos. - Requisitos geométricos de las estructuras densamente empaquetadas. - Empaquetamiento en cristales iónicos. - Requisitos geométricos en cristales covalentes. 7.3. Índices de Millar. 7.4. Difracción de Rayos-X. - Modelo de Bragg. - Modelo de Laue. - Experimentos de difracción: el monocristal y el polvo cristalino. 7.5. Determinación de estructuras cristalinas. 7.6. Difracción de electrones. 7.7. Difracción de neutrones.

Planning				
Methodologies / tests	Competencies	Ordinary class hours	Student's personal work hours	Total hours
Mixed objective/subjective test	A1 A3 A4 A5 A10 A12 A14 A15 A16 A20 A21 A24 A25 B1 B2 B3 B4 C1 C6 C8	4	196	200
Personalized attention		0		0

(\*)The information in the planning table is for guidance only and does not take into account the heterogeneity of the students.

Methodologies	
Methodologies	Description
Mixed objective/subjective test	Asignatura en extinción. Los alumnos tienen derecho a realizar una examen en las fechas de las convocatorias oficiales correspondientes.

Personalized attention	
Methodologies	Description
Mixed objective/subjective test	Se recomienda a los alumnos el uso de tutorías individualizadas para resolver todas las dudas, cuestiones y conceptos que estén claros.

Assessment			
Methodologies	Competencies	Description	Qualification



Mixed objective/subjective test	A1 A3 A4 A5 A10 A12 A14 A15 A16 A20 A21 A24 A25 B1 B2 B3 B4 C1 C6 C8	Pruebas escrita. Se evaluará los conocimientos adquiridos asociados a todos los contenidos de la asignatura.	100
Others			

### Assessment comments

### Sources of information

<b>Basic</b>	<p>PRIMER CUATRIMESTRE:1. BERTRÁN RUSCA, J., NÚÑEZ DELGADO, J. (coords.) (2002). Química Física. Ariel, Barcelona2. BARD, A.J.; FAULKNER, L.R. (2001). Electrochemical methods: fundamentals and applications, 2nd ed.. Wiley: New YorkSEGUNDO CUATRIMESTRE:WANGSNESS, R.K. (1987). Campos Electromagnéticos.. Limusa, MéxicoLEVINE I. N. (2004). Físicoquímica 5ª ed.. McGraw-Hill, MadridADAMSON, A.W. (1997). Physical Chemistry of Surfaces, 6th ed.. John Wiley &amp; Sons, New YorkBERRY R. S., RICE S. A., ROSS J. (2000). Physical Chemistry. 2ª ed.. Oxford University Press, New YorkCASTELLAN G. W. (1983). Physical Chemistry. 3ª ed.. Addison-Wesley, New YorkBARROW, G.M. (1996). Physical Chemistry. 6ª ed.. McGraw-Hill, New YorkATKINS P.W., DE PAULA, J. (2006). Physical Chemistry. 8ª ed.. Oxford University Press, OxfordMCQUARRIE, D.A., SIMONS, J.D. (1997). Physical Chemistry: A Molecular Approach. University Science Books, Sausalito, CaliforniaDÍAZ PEÑA, M Y ROIG, A. (1976). Química Física. Alhambra, MadridATKINS, P.W., DE PAULA, J. (2008). Química Física. 8ª ed.. Panamericana</p>
<b>Complementary</b>	<p>ALDAZ RIERA, A. (1976). Electroquímica. UNED, Madrid RIEGER, P.H. (1994). Electrochemistry. 2nd ed.. Chapman&amp;Hall, New York DAMASKIN B.B., PETRI O.A. (1981). Fundamentos de la Electroquímica teórica. Mir, Moscú BOCKRIS, J.O.M., REDDY, A K.N. (1998). Modern Electrochemistry 1. Ionics. 2nd ed.. Plenum Press, New York BOCKRIS, J.O.M., REDDY, A.K.N., GAMBOA-ADELCO, M.E. (2000). Modern Electrochemistry 2A. Fundamentals of Electrodicts.. Kluwer Academic/Plenum Press: New York CROW, D.R. (1994). Principles and applications of Electrochemistry. 4th ed.. Blackie Academic and Professional, Glasgow KORITA, J, DVORAK, J., KAVAN, L. (1987). Principles of Electrochemistry. 2nd ed.. Wiley, Chichester Otra Bibliografía complementaria ZIELINSKY (2003). "Mathematics in Physical Chemistry". J. Chem. Education, 80(5), 580-581 SASTRE DE VICENTE, M., LÓPEZ FONSECA, J.M. (1993). Métodos voltamétricos. Cap. 1. . Universidade da Coruña SASTRE, M., SANTABALLA, J.A. (1989). "A note on the meaning of the electroneutrality condition for solutions". J.Chem.Education., 66(5), 403 SASTRE DE VICENTE, M. (1993). "Introducing probabilistic concepts in Chemistry: the preparation of a 10 e-24 M solution as a limit case". J.Chem. Education, 102(3), 675 ZIELINSKI, T.J. (1998). "Mathcad in the chemistry Curriculum". J. Chem. Education, 75(9), 1189-1190 SASTRE DE VICENTE, M. (2004). "The Concept of Ionic Strength Eighty Years After its Introduction in Chemistry". J. Chem. Education, 81(5) 750-753 ARCE, F., SASTRE DE VICENTE, M., SANTABALLA, J.A. (1986). Aspectos teórico-prácticos de la medida del pH. Universidad de Santiago de Compostela</p>

### Recommendations

#### Subjects that it is recommended to have taken before

Física/610311101

Química Física/610311202

Introducción a Espectroscopia/610311304

Técnicas Experimentais en Química Física/610311305

Cinetoquímica/610311405

#### Subjects that are recommended to be taken simultaneously

Experimentación en Química Física/610311507

#### Subjects that continue the syllabus

#### Other comments



(\*)The teaching guide is the document in which the URV publishes the information about all its courses. It is a public document and cannot be modified. Only in exceptional cases can it be revised by the competent agent or duly revised so that it is in line with current legislation.