



| Guía Docente          |   |                    |  |          |
|-----------------------|---|--------------------|--|----------|
| Datos Identificativos |   |                    |  | 2016/17  |
| Asignatura (*)        | Profundización en Química Física  | Código             | 610509002  |          |
| Titulación            | Mestrado en Investigación Química e Química Industrial (plan 2016)  |                    |  |          |
| Descritores           |   |                    |  |          |
| Ciclo                 | Período   | Curso              | Tipo   | Créditos |
| Mestrado Oficial      | Anual   | Primeiro           | Obrigatoria  | 3        |
| Idioma                | CastelánInglés  |                    |  |          |
| Modalidade docente    | Presencial  |                    |  |          |
| Prerrequisitos        |   |                    |  |          |
| Departamento          | Química Física e Enxeñaría Química 1  |                    |  |          |
| Coordinación          | Penedo Blanco, Francisco Jose   | Correo electrónico | francisco.penedo.blanco@udc.es                             |          |
| Profesorado           | Penedo Blanco, Francisco Jose<br>Santaballa Lopez, Juan Arturo  | Correo electrónico | francisco.penedo.blanco@udc.es<br>arturo.santaballa@udc.es |          |
| Web                   | miiquimica.webnode.es/  |                    |  |          |
| Descrición xeral      | <p>A asignatura inclúe contidos de Química Física que non se impartiron no Grao de Química, que son fundamentais para poder comprender contidos de outras asignaturas do Máster. Os contidos específicos abordan conceptos e características de forzas intermoleculares, enerxías de interacción entre moléculas, funcións de distribución radial en gases y en fases condensadas, interaccións entre fases en contacto, e modelización do comportamento e reactividade das interfaces. Toda a información docente relativa ás asignaturas deste Máster está centralizada na páxina web que se indica máis arriba, que é referencia para todo o alumnado, independentemente da Universidade donde vaia a cursar os estudos.</p> |                    |  |          |

| Competencias do título |  |
|------------------------|--|
| Código                 | Competencias do título   |
| A1                     | Definir conceptos, principios, teorías e feitos das diferentes áreas especializadas da Química   |
| A2                     | Propoñer alternativas para resolver os problemas químicos complexos das diversas especialidades químicas   |
| A4                     | Innovar en métodos de síntese e análise química relacionados coas diferentes áreas da Química.   |
| B1                     | Posuír e comprender coñecementos que acheguen unha base ou oportunidade de ser orixinais no desenvolvemento e/ou aplicación de ideas, a miúdo nun contexto de investigación  |
| B2                     | Que os estudantes saiban aplicar os coñecementos adquiridos e a súa capacidade de resolución de problemas en contornos novos ou pouco coñecidos dentro de contextos máis amplos (ou multidisciplinares) relacionados coa súa área de estudo. |
| B4                     | Que os estudantes saiban comunicar as súas conclusións e os coñecementos e razóns últimas que as sustentan a públicos especializados e non especializados dun modo claro e sen ambigüedades.   |
| B5                     | Que os estudantes posúan as habilidades de aprendizaxe que lles permitan continuar estudando dun modo que haberá de ser en gran medida autodirixido ou autónomo.   |
| B7                     | Identificar información da literatura utilizando as canles axeitadas e integrar esta información para crear e contextualizar un tema de investigación.   |
| B10                    | Usar a terminoloxía científica en inglés para discutir os resultados experimentais no contexto da profesión química  |
| B11                    | Aplicar correctamente as novas tecnoloxías de capturar e organizar a información para resolver problemas na actividade profesional   |

| Resultados da aprendizaxe   |                        |                                  |
|---|------------------------|----------------------------------|
| Resultados de aprendizaxe   | Competencias do título |                                  |
| Entender conceptos e características das forzas intermoleculares. Comprender os distintos termos que compoñen a enerxía de interacción total entre moléculas. | AM1                    | BM1<br>BM4<br>BM5<br>BM7<br>BM10 |



|  |                   |                          |
|--|-------------------|--------------------------|
| Comprender o significado e a información estrutural que se pode obter da función de distribución radial en gases e fases condensadas.  | AM2               | BM1<br>BM2<br>BM11       |
| Entender as propiedades termodinámicas e estruturais das interaccións entre fases en contacto.<br>Comprender os distintos enfoques na modelización do comportamento e a reactividade das interfaces. | AM1<br>AM2<br>AM4 | BM1<br>BM2<br>BM4<br>BM5 |

| Contidos   |   |
|--|---|
| Temas  | Subtemas  |
| TEMA 1. Propiedades eléctricas das moléculas.                                      | Momentos dipolares eléctricos. Polarizabilidades. Permitividades relativas.   |
| TEMA 2. Interaccións intermoleculares.   | Interaccións dipolo-dipolo. Interacción de dispersión. Enlaces de hidróxeno. Interacción hidrofóbica. Interacción total: potenciais intermoleculares.   |
| TEMA 3. Interaccións intermoleculares en líquidos: función de distribución radial. | Función de distribución radial. Cálculo da función de distribución radial.  |
| TEMA 4. Conceptos xerais sobre interfaces.   | Interfaces como fronteira entre sistemas. Desequilibrio enerxético. Enerxía libre de Gibbs de exceso. Particularidades das interfaces líquido-fase fluída e sólido-fase fluída. Movibilidade molecular en sólidos. Factores que inflúen na enerxía libre superficial de exceso.   |
| TEMA 5. Termodinámica das interaccións na interface.                               | Interfaces líquido-fase fluída. Interfaces sólido-fase fluída. Clasificación en función das forzas intermoleculares e da enerxía implicada na interacción: fisiorción e quimisorción. Monocapas e multicapas de adsorbato. Isotermas, tipos I a V. Determinación de áreas superficiais en sólidos, método BET. Histéresis en adsorción-desorción. |
| TEMA 6. Modelos teóricos de estudo estrutural das interfaces.                      | Conceptos básicos. A dobre capa eléctrica na interface. Transferencia de carga. Aplicación ao estudo de agregados coloidais e a transferencias de carga eléctrica.  |
| TEMA 7. Técnicas experimentais de estudo e caracterización de interfaces.          | Espectroscopia fotoelectrónica. Microscopías.   |

| Planificación          |              |                   |   |              |
|------------------------|--------------|-------------------|---|--------------|
| Metodoloxías / probas  | Competencias | Horas presenciais | Horas non presenciais / traballo autónomo | Horas totais |
| Sesión maxistral       | A1 B1 B2 B10 | 16                | 16  | 32           |
| Seminario              | A4 B4 B7 B11 | 4                 | 6   | 10           |
| Traballos tutelados    | A2 B1 B2 B5  | 4                 | 14  | 18           |
| Proba mixta            | A2 A1 B4 B1  | 4                 | 8   | 12           |
| Atención personalizada |              | 3                 | 0   | 3            |

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

| Metodoloxías        |   |
|---------------------|---|
| Metodoloxías        | Descrición  |
| Sesión maxistral    | Consistirá na exposición e explicación por parte do profesor dos conceptos fundamentais de cada tema, e os desenvolvementos teóricos relacionados.  |
| Seminario           | Consisten en sesións interactivas (grupo reducido) nas que o profesor plantexa exemplos concretos relacionados coas sesións maxistrais. Realízase o estudo de casos e fomentase o debate entre os alumnos e o manexo de diversa documentación científica. |
| Traballos tutelados | En sesións de grupo reducido o alumno terá que resolver, de forma individual ou grupal, os problemas plantexados polo profesor. O alumno presentará por escrito os resultados do traballo, para avaliación posterior.                                     |



|             |  |
|-------------|--|
| Proba mixta | Examen final no que se inclúen preguntas tipo test e exercicios prácticos. Preténdese avaliar os coñecementos adquiridos polos alumnos, así coma a súa capacidade de razoamento, síntese e espírito crítico. |
|-------------|--|

## Atención personalizada

| Metodoloxías                     | Descrición   |
|----------------------------------|--|
| Traballos tutelados<br>Seminario | <p>Ao longo de tódalas sesións de grupos reducidos potenciarase a tutorización do alumno, axudándolle no plantexamento de dúbidas e a súa resolución.</p> <p>A atención personalizada programarase ao longo do periodo de clases, mediante test interactivos que teñen como finalidade avaliar o avance do alumno no acadamento das competencias previstas.</p> <p>O alumno poderá solicitar tutorías individuais no despacho do profesor, no horario correspondente, que estará publicado na web da Facultade ao comezo do curso.</p> <p>No caso específico de alumnos con dedicación parcial, ou dispensa de asistencia, estas metodoloxías serán levadas mediante asistencia online interactiva, email ou moodle, cunha distribución temporal semellante ás clases de grupo reducido programadas.</p> |

## Avaliación

| Metodoloxías        | Competencias | Descrición  | Cualificación |
|---------------------|--------------|---|---------------|
| Traballos tutelados | A2 B1 B2 B5  | O traballo presentado por escrito (exercicios prácticos) será cualificado segundo a metodoloxía aplicada, a optimización da resolución e a exactitud dos resultados.  | 20            |
| Proba mixta         | A2 A1 B4 B1  | Cada alumno deberá realizar unha proba na que deberá amosar a súa capacidade para resolver problemas e cuestións conceptuais de resposta múltiple. A avaliación terá en conta os coñecementos amosados e a calidade dos resultados obtidos. | 75            |
| Seminario           | A4 B4 B7 B11 | A avaliación do alumno nestas sesións baséase na participación do alumno nos debates e cuestións plantexadas no aula, e na observación das súas habilidades na resolución de problemas.   | 5             |

## Observacións avaliación



Para superar a materia hai dous requisitos básicos:

1) Asistencia regular a tódalas actividades avaliadas, agás para os alumnos con dedicación parcial ou dispensa de asistencia, tal como se indica máis abaixo.

2) Acadar unha

cualificación mínima de 4 (sobre 10) en cada unha das actividades avaliadas. De non acadar a devandita puntuación mínima nalgunha desas actividades, a cualificación final será de Suspenso (4.0). Para aprobar a materia a cualificación total non poderá ser inferior a 5 (sobre 10).

O alumno terá a cualificación de Non Presentado cando participe en actividades que sumen menos do 25% da cualificación total.

No

contexto de avaliación continua, as cualificacións obtidas nos seminarios e traballos tutelados poderán conservarse para a segunda oportunidade, sempre a cando superen a mínima de 4 citada previamente. A cualificación da proba mixta obtida nesta segunda oportunidade substituirá á da primeira.

Os alumnos avaliados na segunda

oportunidade solo poderán optar a matrícula de honra se o número máximo destas para o curso non se esgotaron na primeira.

Nos seguintes

cursos académicos, o proceso de ensinanza-aprendizaxe, incluída a avaliación, iníciase de novo, o que implica que o alumno que non supere a materia neste curso deberá realizar todas as actividades programadas para o novo curso.

No caso de alumnos con dedicación parcial, ou dispensa de asistencia, tódalas actividades avaliadas poden ser levadas a cabo online, e cualificadas do mesmo xeito que se foran presenciais, polo que non é preciso un protocolo específico.

## Fontes de información

### Bibliografía básica

- P. Atkins, J. de Paula (2014). Physical Chemistry, 10th ed.. Oxford University Press
- I. N. Levine (2004). Fisicoquímica, 5th ed.. McGraw-Hill
- F. MacRitchie (1990). Chemistry at Interfaces. Academic Press
- D. Myers (1999). Surfaces, Interfaces and Colloids: Principles and Applications. VCH Publishers

### Bibliografía complementaria

- J.M. Hollas (2004). Modern Spectroscopy, 4th ed.. John Wiley&Sons
- S.R. Morrison (1990). The Chemical Physics of Surfaces, 2nd ed.. Plenum Press

## Recomendacións

### Materias que se recomenda ter cursado previamente

### Materias que se recomenda cursar simultaneamente

### Materias que continúan o temario

## Observacións

(\*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

