



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		Correo electrónico	francisco.penedo.blanco@udc.es
	Santaballa Lopez, Juan Arturo			arturo.santaballa@udc.es
Web	miiquimica.webnode.es/			
Descrición xeral	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.			

Competencias / Resultados do título	
Código	Competencias / Resultados 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 / Resultados do título	
Entender conceptos e características das forzas intermoleculares. Comprender os distintos termos que compoñen a enerxía de interacción total entre moléculas.		AM1	BM1
			BM4
			BM5
			BM7
			BM10



Comprender o significado e a información estrutural que se pode obter da función de distribución radial en gases e fases condensadas.	AM2	BM1 BM2 BM11	
Entender as propiedades termodinámicas e estruturais das interaccións entre fases en contacto. Comprender os distintos enfoques na modelización do comportamento e a reactividade das interfaces.	AM1 AM2 AM4	BM1 BM2 BM4 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 fluida e sólido-fase fluida. Movibilidade molecular en sólidos. Factores que inflúen na enerxía libre superficial de exceso.
TEMA 5. Termodinámica das interaccións na interface.	Interfaces líquido-fase fluida. Interfaces sólido-fase fluida. Clasificación en función das forzas intermoleculares e da enerxía implicada na interacción: fisisorción 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 / Resultados	Horas lectivas (presenciais e virtuais)	Horas 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. Realizarase o estudo de casos e fomentarase 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 Seminario	Ao longo de tódalas sesións de grupos reducidos potenciarase a tutorización do alumno, axudándolle no plantexamento de dúbidas e a súa resolución. 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. O alumno poderá solicitar tutorías individuais no despacho do profesor, no horario correspondente, que estará publicado na web da Facultade ao comezo do curso. 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.

Avaliación

Metodoloxías	Competencias / Resultados	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

