



Guía Docente				
Datos Identificativos				2016/17
Asignatura (*)	Química Física Avanzada	Código	610G01020	
Titulación				
Descritores				
Ciclo	Período	Curso	Tipo	Créditos
Grao	1º cuatrimestre	Cuarto	Obrigatoria	6
Idioma	CastelánInglés			
Modalidade docente	Presencial			
Prerrequisitos				
Departamento	Química Física e Enxeñaría Química 1			
Coordinación	Iglesias Martinez, Emilia	Correo electrónico	emilia.iglesias@udc.es	
Profesorado	Brandariz Lendoiro, María Isabel Iglesias Martinez, Emilia	Correo electrónico	i.brandariz@udc.es 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>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>			

Competencias / Resultados do título	
Código	Competencias / Resultados do título

Resultados da aprendizaxe			
Resultados de aprendizaxe	Competencias / Resultados do título		
<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 A27	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 A27	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. dedución de mecanismos de reacción.</li> </ul>
Teorías cinetoquímicas e aplicacións	<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 a 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	Competencias / Resultados	Horas lectivas (presenciais e virtuais)	Horas traballo autónomo	Horas totais
Sesión maxistral	A25 A27 B3	21	42	63
Seminario	A25 A27 B1 B3 C6	7	14	21
Prácticas de laboratorio	A19 A20 A22 A23 A25 A27 B1 B3 B4 C3	20	40	60
Proba mixta	A1 A3 A4 A10 A14 A20	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. O alumno será quen explique e expoña a resolución dos problemas.
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, xunto coa exposición /discusión en seminario dos resultados obtidos. 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 exercicios 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 tutorías 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	Competencias / Resultados	Descrición	Cualificación
Seminario	A25 A27 B1 B3 C6	<p>? As sesións de seminario basearanse no traballo do alumno, que encontrará nesta actividade o marco axeitado para expoñer o súa maneira de entender a asignatura. 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>? A avaliación desta actividade será baseada no traballo persoal nas sesións de seminario.</p>	10



Prácticas de laboratorio	A19 A20 A22 A23 A25 A27 B1 B3 B4 C3	<p>? Reflicten a destreza e capacidade do alumno na planificación, deseño e desenvolvemento de experimentos sinxelos.</p> <p>? Ensaio de distintas técnicas para caracterizar os diferentes sistemas ou procesos no seguimento dunha reacción química.</p> <p>? Tratamento cuantitativo dos resultados experimentais según os modelos introducidos e explicación dos mesmos en base a modelos teóricos.</p> <p>? A entrega dun informe de laboratorio que reflecta os conceptos anteriores é necesaria.</p> <p>? Na avaliación desta actividade é tido en conta o traballo de laboratorio, os resultados obtidos eo informe preparado.</p>	20
Proba mixta	A1 A3 A4 A10 A14 A20	<p>? A realización da proba escrita consta de cuestións teóricas e prácticas derivadas dos contidos teóricos do curso, dos seminarios e das prácticas.</p> <p>? Para aprobar a asignatura é necesario superar as prácticas e a proba mixta. A puntuación obtida dunha actividade superada, manterase nas seguintes convocatorias do curso.</p> <p>? En caso de non aprobar a asignatura, a calificación que figura na Acta, será a media das actividades non-superadas.</p> <p>? O alumno obterá a cualificación de Non Presentado cando non se presentase exame oficial (Programación da Facultade)</p>	70

### Observacións avaliación

- A asistencia a totalidade das prácticas de laboratorio e a entrega do correspondente Informe son obrigatorios.
- A asistencia os seminarios e obrigatoria pos alumnos de primeira matrícula na asignatura a tempo completo.
- A calificación de matrícula otorgarase preferentemente na primeira oportunidade.
- Otorgarase a calificación de "Non presentado" cando se participou en actividades que sumen menos do 50% da calificación final.
- Segunda oportunidade: repetición da proba mixta sobre contidos dos seminarios, prácticas e clases de teoría.

### 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>- 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>Bibliografía 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 Electrodics.. Kluwer Academic/Plenum Press: New York</li> </ul>

### Recomendacións

**Materias que se recomenda ter 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

#### Materias que se recomenda cursar simultaneamente

#### Materias que continúan o temario

#### 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 coñecer inglés 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