



| Guía Docente | | | | |
|-----------------------|--|--------------------|------------------------|----------|
| Datos Identificativos | | | | 2016/17 |
| Asignatura (*) | Química Física Avanzada | Código | 610G01020 | |
| Titulación | Grao en Química | | | |
| 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 | Correo electrónico | i.brandariz@udc.es | |
| | Iglesias Martinez, Emilia | | emilia.iglesias@udc.es | |
| Web | campusvirtual.udc.es | | | |
| Descrición xeral | <p>PALABRAS CLAVE: 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>DESCRIPCIÓN: 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 |
| 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. |
| A10 | Coñecer a cinética do cambio químico, incluíndo a catálise e os mecanismos de reacción. |
| A14 | Demostrar o coñecemento e comprensión de conceptos, principios e teorías relacionadas coa Química. |
| A19 | Levar a cabo procedementos estándares e manexar a instrumentación científica. |
| A20 | Interpretar os datos procedentes de observacións e medidas no laboratorio. |
| A22 | Planificar, deseñar e desenvolver proxectos e experimentos. |
| A23 | Desenvolver unha actitude crítica de perfeccionamento na labor experimental. |
| A25 | Relacionar a Química con outras disciplinas e recoñecer e valorar os procesos químicos na vida diaria. |
| A27 | Impartir docencia en química e materias afíns nos distintos niveis educativos. |
| B1 | Aprender a aprender. |
| B3 | Aplicar un pensamento crítico, lóxico e creativo. |
| B4 | Traballar de forma autónoma con iniciativa. |
| C3 | Utilizar as ferramentas básicas das tecnoloxías da información e as comunicacións (TIC) necesarias para o exercicio da súa profesión e para a aprendizaxe ao longo da súa vida. |
| C6 | Valorar criticamente o coñecemento, a tecnoloxía e a información dispoñible para resolver os problemas cos que deben enfrontarse. |

| Resultados da aprendizaxe | |
|---------------------------|-------------------------------------|
| Resultados de aprendizaxe | Competencias / Resultados do título |



| | | | |
|--|---------------------------------------|----------------|----------|
| <p>Metodolóxicas:</p> <ul style="list-style-type: none"> · Ser capaz de planificar, proxectar e realizar experimentos relacionados co transporte de materia e de carga. · Ser capaz de propoñer e elaborar un estudo cinético dunha reacción química. · Aplicación de programas informáticos sinxelos para o análise cuantitativo dos datos cinéticos. · Interpretación dos resultados en base a un mecanismo de reacción. · Simulación / predicción de datos non publicados partindo da ecuación de velocidade. | A3 A19 A20 A22 A23 A27 | B3 | C3 |
| <p>Conceptual:</p> <ul style="list-style-type: none"> · Coñecemento das interaccións interiónicas e inter- ou intramoleculares e a súa relación cos fenómenos de asociación, auto-agregación ou conformación molecular. · Manexar os métodos propios da cinética química. Interpretación a nivel molecular (mecanicista) das reaccións químicas. <p>Entender e coñecer os factores que poden modificar a velocidade dunha reacción.</p> <ul style="list-style-type: none"> · Comprender o proceso de catálise e súa relación coa activación química, fotoquímica ou electroquímica. | A1 A4 A10 A14 | B3 | |
| <p>Actitudinales:</p> <ul style="list-style-type: none"> · Presentar informes axeitados dun estudo experimental · Analizar e criticar estudos cinéticos publicados de dificultade baixa. | A23 A25 A27 | B1 B3 B4 | C3 C6 |

| Contidos | |
|--|--|
| Temas | Subtemas |
| Interaccións iónicas e moleculares | <ul style="list-style-type: none"> · Interaccións entre ións en disolución: coeficiente de actividade. Lei de Debye-Hückel. Forza iónica. · As interaccións entre as moléculas. Momento dipolar. Polarizabilidade: Clausius-Mossotti. Interaccións dipolares. Interacción hidrofóbica: autoagregación e conformación molecular. · Colóides: micelas directa e inversa, membranas biolóxicas. · Macromoléculas |
| Fenómenos de transporte | <ul style="list-style-type: none"> · Ecuacións fenomenolóxicas. Fluxo. Difusión. Lei de Fick. Ecuación de Stokes-Einstein. · Conductividade térmica · Conductividade eléctrica: Teoría de Debye-Huckel-Onsager. · Viscosidade |
| Ecuación de velocidade e mecanismo de reacción | <ul style="list-style-type: none"> · 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. · Esquemas complexos de reacción: reaccións paralelas, reaccións reversibles, reaccións consecutivas. · Aproximación do estado estacionario. · Mecanismos de reacción, reacción elemental. dedución de mecanismos de reacción. |
| Teorías cinetoquímicas e aplicacións | <ul style="list-style-type: none"> · Teoría de colisións: factor de frecuencias · Teoría do complexo activado: aproximación según a Termodinámica Estadística e según a Termodinámica clásica. Curvas de enerxía potencial · Reaccións en fase gas: mecanismo de Lindeman · Reaccións en disolución. Reaccións controladas pola difusión dos reactivos. · Reaccións de transferencia electrónica · Reaccións fotoquímicas |
| Catálise | <ul style="list-style-type: none"> · Catálise homoxénea, heteroxénea e microheteroxénea · Mecanismo xeral de catálise: ecuacións de velocidade · Catálise homoxénea: catálise nucleófila, catálise ácido-base · Correlacións de enerxía libre · Catálise microheteroxénea: catálise micelar; catálise enzimática. Inhibición |



| | |
|--|--|
| Introducción a cinética electroquímica | <ul style="list-style-type: none"> · Reaccións electroquímicas: aspectos singulares · Interfase electrodo-disolución: modelo de Gouy-Chapman · Velocidade de transferencia de carga. Ecuación de Butler-Volmer · Voltametría |
| Prácticas | · Experimentos de Laboratorio relacionados con fenómenos de transporte, determinación de ecuacións de velocidade e procesos de catálise. |

| 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 desenvolvemento do experimento 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 titorías 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 | ? As sesións de seminario basearase 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. ? A avaliación desta actividade será baseada no traballo persoal nas sesións de seminario. | 10 |
| Prácticas de laboratorio | A19 A20 A22 A23 A25 A27 B1 B3 B4 C3 | ? Reflicten a destreza e capacidade do alumno na planificación, deseño e desenvolvemento de experimentos sinxelos. ? Ensaio de distintas técnicas para caracterizar os diferentes sistemas ou procesos no seguimento dunha reacción química. ? Tratamento cuantitativo dos resultados experimentais según os modelos introducidos e explicación dos mesmos en base a modelos teóricos. ? A entrega dun informe de laboratorio que reflicta os conceptos anteriores é necesaria. ? Na avaliación desta actividade é tido en conta o traballo de laboratorio, os resultados obtidos eo informe preparado. | 20 |
| Proba mixta | A1 A3 A4 A10 A14 A20 | ? A realización da proba escrita consta de cuestións teóricas e prácticas derivadas dos contidos teóricos do curso, dos seminarios e das prácticas. ? 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. ? En caso de non aprobar a asignatura, a calificación que figura na Acta, será a media das actividades non-superadas. ? O alumno obterá a cualificación de Non Presentado cando non se presentase exame oficial (Programación da Facultade) | 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

Bibliografía básica

- P. W. Atkins, J. de Paula (2008). Química Física, 8ª Ed. . Panamericana
- Espenson J. H. (1995). Chemical kinetics and reaction mechanisms 2ª ed.. McGraw-Hill, New York.
- Laidler K. J. (1994). Chemical Kinetics . Harper and Row, New York.
- Bockris, J.O.M., Reddy, A K.N. (1998). Modern Electrochemistry 1. Ionics. 2nd ed.. Plenum Press, New York



| | |
|------------------------------------|--|
| Bibliografía complementaria | <ul style="list-style-type: none">- P. L. Brezonik (1994). Chemical Kinetics and Process Dynamic in Aquatic Systems.. Lewis Publishers- P. Sanz Pedredo (1992). Físicoquímica para Farmacia y Biología.. Masson-Salvat Medicina- R. A. Jackson (2004). Mechanism in Organic Reactions.. Royal Society of Chemistry (RSC)- LEVINE I. N. (2004). Físicoquímica 5ª ed.. McGraw-Hill, Madrid- KORITA, J, DVORAK, J., KAVAN, L. (1987). Principles of Electrochemistry. 2nd ed.. Wiley, Chichester- BERRY R. S., RICE S. A., ROSS J. (2000). Physical Chemistry. 2ª ed.. Oxford University Press, New York- J. BERTRAN-RUSCA, J. NUÑEZ-DELGADO Eds , (2002). Química Física, vol. II. Ariel Ciencia- S. R. Logan (2000). Fundamentos de Cinética Química. Addison Wesley- BOCKRIS, J.O.M., REDDY, A.K.N., GAMBOA-ADELCO, M.E. (2000). Modern Electrochemistry 2A. Fundamentals of Electrodeics.. Kluwer Academic/Plenum Press: New York |
|------------------------------------|--|

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