



Guía Docente				
Datos Identificativos				2017/18
Asignatura (*)	Química Física Avanzada	Código	610G01020	
Titulación				
Descritores				
Ciclo	Período	Curso	Tipo	Créditos
Grao	1º cuatrimestre	Cuarto	Obrigatoria	6
Idioma	Castelán/Inglés			
Modalidade docente	Presencial			
Prerrequisitos				
Departamento	Química			
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>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

Resultados da aprendizaxe			
Resultados de aprendizaxe		Competencias / Resultados do título	
Metodolóxicas:		A3	B3
· Ser capaz de planificar, proxectar e realizar experimentos relacionados co transporte de materia e de carga.		A19	
· Ser capaz de propoñer e elaborar un estudo cinético dunha reacción química.		A20	
· Aplicación de programs informáticos sinxelos para o análise cuantitativo dos datos cinéticos.		A23	
· Interpretación dos resultados en base a un mecanismo de reacción.		A27	
· Simulación / predicción de datos non publicados partindo da ecuación de velocidade.			
Conceptual:		A1	B3
· Coñecemento das interaccións interiónicas e inter- ou intramoleculares e a súa relación cos fenómenos de asociación, auto-agregación ou conformación molecular.		A4	
· Manexar os métodos propios da cinética química. Interpretación a nivel molecular (mecanicista) das reaccións químicas.		A10	
Entender e coñecer os factores que poden modificar a velocidade dunha reacción.		A14	
· Comprender o proceso de catálise e súa relación coa activación química, fotoquímica ou electroquímica.			
Actitudinais:		A22	B1
· Presentar informes axeitados dun estudo experimental		A23	B3
· Analizar e criticar estudos cinéticos publicados de dificultade baixa.		A25	B4
		A27	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 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.
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	<ul style="list-style-type: none"> · 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 B3 B1 C6	7	28	35
Prácticas de laboratorio	A19 A20 A22 A23 A25 A27 B1 B3 B4 C3	20	20	40
Presentación oral	A20 A27 B3 C6 C3	1	5	6
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 do material que complementa a clase. 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 do alumno, 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 ou exposición sobre a labor realizada no laboratorio e a discusión dos resultados, segundo a orientación do profesor. Será necesario realizar as prácticas de laboratorio para aprobar a asignatura.
Presentación oral	? Presentación dos resultados obtidos nas prácticas de laboratorio facendo uso das tecnoloxías da información e comunicación. Debate e crítica dos mesmos en grupo.
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 ejercicios e / ou cuestións conceptuais.

Atención personalizada	
Metodoloxías	Descrición
Sesión maxistral	<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, prácticas de laboratorio ou na preparación da proba final. Os profesores estarán a dispor dos alumnos para resolver calquer tipo de dúbidas sobre a asignatura no horario de atención establecido.</p> <p>Os alumnos a tempo parcial ou con dispensa académica de asistencia disporán de tutorías tanto presenciais como por correo electrónico, sempre que o necesiten.</p> <p>Antes de realizar o traballo experimental, o alumno fará un guión do artigo científico que resume a experiencia que vai reproducir. Durante o desenrolo 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>
Seminario	
Prácticas de laboratorio	
Presentación oral	

Avaliación			
Metodoloxías	Competencias / Resultados	Descrición	Cualificación
Seminario	A25 A27 B3 B1 C6	? 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.	5



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 ou exposición dos resultados que reflecta os conceptos anteriores é necesaria.</p> <p>? Na avaliación desta actividade é tido en conta o traballo de laboratorio, os resultados obtidos e o informe preparado ou exposición.</p>	5
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 faga as prácticas de laboratorio e, por tanto, tampouco se presente a proba mixta.</p>	80
Presentación oral	A20 A27 B3 C6 C3	<p>? Exposición e análise crítica dos resultados das prácticas de laboratorio.</p> <p>? Calidade da información producida na presentación e as habilidades mostradas na comunicación.</p> <p>? Capacidade para defender e contrastar os seus resultados</p>	10

Observacións avaliación

- A asistencia a totalidade das prácticas de laboratorio e a entrega do correspondente Informe son obrigatorios.
- A asistencia os seminarios e obligatoria pos alumnos de primeira matrícula na asignatura a tempo completo.
- A calificación de matrícula otorgarase preferentemente na primeira oportunidade. -Segunda oportunidade: repetición da proba mixta sobre contidos dos seminarios, prácticas e clases de teoría.

Fontes de información

Bibliografía básica	<ul style="list-style-type: none"> - 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 Electrodics.. Kluwer Academic/Plenum Press: New York

Recomendacións

Materias que se recomenda ter cursado previamente



Química Xeral 1/610G01007

Química Xeral 2/610G01008

Química Xeral 3/610G01009

Laboratorio de Química 1/610G01010

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