



## Guía Docente

| Guía Docente          |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |                    |         |           |
|-----------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------|---------|-----------|
| Datos Identificativos |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |                    |         | 2018/19   |
| Asignatura (*)        | Química Física Avanzada                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |                    | Código  | 610311501 |
| Titulación            | Licenciado en Química                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               |                    |         |           |
| Descriptores          |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |                    |         |           |
| Ciclo                 | Período                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             | Curso              | Tipo    | Créditos  |
| 1º e 2º Ciclo         | Anual                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               | Quinto             | Troncal | 8         |
| Idioma                | Castelán                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            |                    |         |           |
| Modalidade docente    | Presencial                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          |                    |         |           |
| Prerrequisitos        |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |                    |         |           |
| Departamento          | Química                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |                    |         |           |
| Coordinación          |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     | Correo electrónico |         |           |
| Profesorado           |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     | Correo electrónico |         |           |
| Web                   |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |                    |         |           |
| Descrición xeral      | <p>Asignatura troncal del ultimo curso de la titulación. Forma parte del bloque formativo de Química Física constituido por cuatro asignaturas troncales (dos de laboratorio), dos obligatorias y varias optativas.</p> <p>Se espera que el alumno posea ya los conocimientos generales desarrollados en las materias de Física, Química Física, Introducción a la Espectroscopia y Cinetoquímica.</p> <p>Por tratarse de una materia de último curso, la formación del alumno implica/supone un doble propósito:</p> <ul style="list-style-type: none"><li>- Completar la formación en conocimientos químico físicos todavía no adquiridos, tales como los fenómenos de superficie y de transporte. Se completan así los contenidos teóricos troncales de Química Física en la titulación.</li><li>- Profundizar en ciertos contenidos ya desarrollados en cursos anteriores, tales como la Cinética y la Electroquímica, con objeto de que el alumno tenga una idea más clara de su aplicabilidad tanto en la industria como en la adquisición de nuevos conocimientos más específicos.</li></ul> |                    |         |           |

## Competencias do título

| Código | Competencias 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.                                               |
| A5     | Comprender os principios da termodinámica e as súas aplicacións en Química.                                                                   |
| A10    | Coñecer a cinética do cambio químico, incluíndo a catálise e os mecanismos de reacción.                                                       |
| A12    | Relacionar as propiedades macroscópicas coas de átomos e moléculas.                                                                           |
| A14    | Demostrar o coñecemento e comprensión de conceptos, principios e teorías relacionadas coa Química.                                            |
| A15    | Recoñecer e analizar novos problemas e planear estratexias para solucionarlos.                                                                |
| A16    | Adquirir, avaliar e utilizar os datos e información bibliográfica e técnica relacionada coa Química.                                          |
| A20    | Interpretar os datos procedentes de observacións e medidas no laboratorio.                                                                    |
| A21    | Comprender os aspectos cualitativos e cuantitativos dos problemas químicos.                                                                   |
| A24    | Explicar, de xeito comprensible, fenómenos e procesos relacionados coa Química.                                                               |
| A25    | Relacionar a Química con outras disciplinas e recoñecer e valorar os procesos químicos na vida diaria.                                        |
| B1     | Aprender a aprender.                                                                                                                          |
| B2     | Resolver problemas de forma efectiva.                                                                                                         |
| B3     | Aplicar un pensamento crítico, lóxico e creativo.                                                                                             |
| B4     | Traballar de forma autónoma con iniciativa.                                                                                                   |
| C1     | Expresarse correctamente, tanto de forma oral coma escrita, nas linguas oficiais da comunidade autónoma.                                      |
| C6     | Valorar criticamente o coñecemento, a tecnoloxía e a información dispoñible para resolver os problemas cos que deben enfrontarse.             |
| C8     | Valorar a importancia que ten a investigación, a innovación e o desenvolvemento tecnolóxico no avance socioeconómico e cultural da sociedade. |

## Resultados da aprendizaxe

| Resultados de aprendizaxe                                                                                                                                                                                                                                                               | Competencias do título                              |                      |                |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------|----------------------|----------------|
| Entender las ecuaciones matemáticas que gobiernan los fenómenos bajo estudio, así como manejarlas haciendo uso de los distintos sistemas de unidades.                                                                                                                                   | A1<br>A15<br>A16<br>A20<br>A21<br>A24<br>A25        | B1<br>B2<br>B3<br>B4 | C1<br>C6<br>C8 |
| Comprender a nivel microscópico los fenómenos de transporte.                                                                                                                                                                                                                            | A1<br>A12<br>A24                                    | B1<br>B2<br>B3<br>B4 | C1             |
| Profundizar en el estudio de las interacciones iónicas en disolución.                                                                                                                                                                                                                   | A1<br>A12<br>A24                                    | B1<br>B2<br>B3<br>B4 | C1             |
| Conocer los métodos experimentales que permiten la obtención de magnitudes moleculares, en particular, aquellos en los que la interacción de la radiación electromagnética con la materia se produce sin absorción de energía (métodos eléctricos y magnéticos, métodos de difracción). | A1<br>A3<br>A12                                     | B1<br>B2<br>B3<br>B4 | C1             |
| Conocer los fundamentos de la transferencia de carga a través de un electrodo y la influencia del potencial sobre la velocidad de la misma.                                                                                                                                             | A1<br>A5<br>A20<br>A21<br>A24<br>A25                | B1<br>B2<br>B3       | C6<br>C8       |
| Adquirir los conocimientos teóricos y experimentales para abordar los fenómenos de superficie.                                                                                                                                                                                          | A1<br>A5<br>A14<br>A15<br>A16<br>A21<br>A24<br>A25  | B1<br>B2<br>B3       | C6<br>C8       |
| Adquirir los conocimientos teóricos y experimentales necesarios para enjuiciar los cambios asociados a las reacciones químicas heterogéneas.                                                                                                                                            | A4<br>A10<br>A14<br>A15<br>A20<br>A21<br>A24<br>A25 | B1<br>B2<br>B3       | C6<br>C8       |
| Familiarizarse con los conceptos básicos necesarios para el estudio de las propiedades y la caracterización de los procesos interfaciales electroquímicos.                                                                                                                              | A1<br>A5<br>A14<br>A20<br>A21<br>A24<br>A25         | B1<br>B2<br>B3       | C6<br>C8       |



| Contidos                                                                        |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |
|---------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Temas                                                                           | Subtemas                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          |
| 1. Fisicoquímica de superficies: estudio termodinámico de la interfase.         | 1.1. Región interfacial o interfase.<br>1.2. Tensión superficial.<br>1.3. Interfases curvas. <ul style="list-style-type: none"><li>- Ecuación de Young-Laplace.</li><li>- Presión de vapor en superficies curvas: ecuación de Kelvin.</li><li>- Capilaridad.</li></ul> 1.4. Termodinámica de superficies en sistemas multicomponente: Isoterma de adsorción de Gibbs.<br>1.5. Monocapas.                                                                                                                                                                                                          |
| 2. Superficies sólidas: adsorción y catálisis heterogénea.                      | 2.1. Adsorción de gases sobre sólidos.<br>2.2. Fisisorción y Quimisorción.<br>2.3. Isotermas de adsorción: clasificación.<br>2.4. Isoterma de Langmuir.<br>2.5. Isoterma BET.<br>2.6. Otras isotermas.<br>2.7. Catálisis heterogénea.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |
| 3. Interfases electrizadas.                                                     | 3.1. Introducción.<br>3.2. Termodinámica de la interfase electrizada. Ecuación electrocapilar.<br>3.3. Estructura de la interfase <ul style="list-style-type: none"><li>- Modelo de Helmholtz-Perrin o de la doble capa rígida.</li><li>- Modelo de Gouy-Chapman o de la doble capa difusa.</li><li>- Modelo de Stern-Grahame.</li></ul> 3.4. Doble capa y coloides.<br>3.5. Cinética electrodica.                                                                                                                                                                                                |
| 4. Interacciones iónicas en disolución.                                         | 4.0. Introducción.<br>4.1. Interacciones ión-disolvente. <ul style="list-style-type: none"><li>- Comentarios sobre la estructura del agua.</li><li>- Interacciones ión-disolvente.</li><li>- Ecuación de Born.</li><li>- Efectos de la hidratación.</li></ul> 4.2. Interacciones ión-ión. <ul style="list-style-type: none"><li>- Teoría de Debye-Hückel.</li><li>- La nube iónica.</li><li>- Coeficiente de actividad de un ión.</li><li>- El parámetro de tamaño.</li><li>- Coeficiente de actividad iónico medio.</li><li>- La ley límite.</li><li>- El comportamiento experimental.</li></ul> |
| 5. Procesos de transporte en disoluciones electrolíticas: conductividad iónica. | 5.1. Conducción y conductividad eléctrica.<br>5.2. Conductividad molar.<br>5.3. Movilidades iónicas.<br>5.4. Teoría de Debye-Hückel-Onsager.<br>5.5. Aplicaciones de las medidas de conductividad.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |



|                                                   |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          |
|---------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 6. Propiedades eléctricas de la materia.          | 6.0. Introducción.<br>6.1. Desarrollo multipolar del potencial escalar.<br>6.2. Interacción de un campo eléctrico estático con un dieléctrico.<br>- Moléculas no polares: polarización por distorsión. Ecuación de Clausius-Mossotti.<br>- Moléculas con momento bipolar permanente: polarización por orientación. Ecuación de Debye.<br>6.3. Determinación de momentos bipolares y polarizabilidades.<br>- Índice de refracción y polarización.<br>- Medida del momento bipolar permanente a partir de la constante dieléctrica.<br>6.4. Aplicación de la medida de momentos bipolares. |
| 7. Difracción de Rayos-X, electrones y neutrones. | 7.1. La celda unidad y la estructura cristalina.<br>7.2. Estructuras cristalinas en distintos tipos de sólidos.<br>- Requisitos geométricos de las estructuras densamente empaquetadas.<br>- Empaquetamiento en cristales iónicos.<br>- Requisitos geométricos en cristales covalentes.<br>7.3. Índices de Millar.<br>7.4. Difracción de Rayos-X.<br>- Modelo de Bragg.<br>- Modelo de Laue.<br>- Experimentos de difracción: el monocristal y el polvo cristalino.<br>7.5. Determinación de estructuras cristalinas.<br>7.6. Difracción de electrones.<br>7.7. Difracción de neutrones. |

| Planificación                                                                                                            |                                                                               |                   |                                           |              |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------|-------------------|-------------------------------------------|--------------|
| Metodoloxías / probas                                                                                                    | Competencias                                                                  | Horas presenciais | Horas non presenciais / traballo autónomo | Horas totais |
| Proba mixta                                                                                                              | A1 A3 A4 A5 A10 A12<br>A14 A15 A16 A20<br>A21 A24 A25 B1 B2<br>B3 B4 C1 C6 C8 | 4                 | 196                                       | 200          |
| Atención personalizada                                                                                                   |                                                                               | 0                 |                                           | 0            |
| *Os datos que aparecen na táboa de planificación son de carácter orientativo, considerando a heteroxeneidade do alumnado |                                                                               |                   |                                           |              |

| Metodoloxías |                                                                                                                                          |
|--------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Metodoloxías | Descrición                                                                                                                               |
| Proba mixta  | Asignatura en extinción. Los alumnos tienen derecho a realizar una examen en las fechas de las convocatorias oficiales correspondientes. |

| Atención personalizada |                                                                                                                                         |
|------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Metodoloxías           | Descrición                                                                                                                              |
| Proba mixta            | Se recomienda a los alumnos el uso de tutorías individualizadas para resolver todas las dudas, cuestiones y conceptos que estén claros. |

| Avaliación   |              |            |               |
|--------------|--------------|------------|---------------|
| Metodoloxías | Competencias | Descrición | Cualificación |



|             |                                                                               |                                                                                                              |     |
|-------------|-------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| Proba mixta | A1 A3 A4 A5 A10 A12<br>A14 A15 A16 A20<br>A21 A24 A25 B1 B2<br>B3 B4 C1 C6 C8 | Pruebas escrita. Se evaluará los conocimientos adquiridos asociados a todos los contenidos de la asignatura. | 100 |
| Outros      |                                                                               |                                                                                                              |     |

## Observacións avaliación

## Fontes de información

|                                    |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |
|------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>Bibliografía básica</b>         | <p>PRIMER CUATRIMESTRE:1. BERTRÁN RUSCA, J., NÚÑEZ DELGADO, J. (coords.) (2002). Química Física. Ariel, Barcelona2. BARD, A.J.; FAULKNER, L.R. (2001). Electrochemical methods: fundamentals and applications, 2nd ed.. Wiley: New YorkSEGUNDO CUATRIMESTRE:WANGSNESS, R.K. (1987). Campos Electromagnéticos.. Limusa, MéxicoLEVINE I. N. (2004). Físicoquímica 5ª ed.. McGraw-Hill, MadridADAMSON, A.W. (1997). Physical Chemistry of Surfaces, 6th ed.. John Wiley &amp; Sons, New YorkBERRY R. S., RICE S. A., ROSS J. (2000). Physical Chemistry. 2ª ed.. Oxford University Press, New YorkCASTELLAN G. W. (1983). Physical Chemistry. 3ª ed.. Addison-Wesley, New YorkBARROW, G.M. (1996). Physical Chemistry. 6ª ed.. McGraw-Hill, New YorkATKINS P.W., DE PAULA, J. (2006). Physical Chemistry. 8ª ed.. Oxford University Press, OxfordMCQUARRIE, D.A., SIMONS, J.D. (1997). Physical Chemistry: A Molecular Approach. University Science Books, Sausalito, CaliforniaDÍAZ PEÑA, M Y ROIG, A. (1976). Química Física. Alhambra, MadridATKINS, P.W., DE PAULA, J. (2008). Química Física. 8ª ed.. Panamericana</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            |
| <b>Bibliografía complementaria</b> | <p>ALDAZ RIERA, A. (1976). Electroquímica. UNED, Madrid RIEGER, P.H. (1994). Electrochemistry. 2nd ed.. Chapman&amp;Hall, New York DAMASKIN B.B., PETRI O.A. (1981). Fundamentos de la Electroquímica teórica. Mir, Moscú BOCKRIS, J.O.M., REDDY, A K.N. (1998). Modern Electrochemistry 1. Ionics. 2nd ed.. Plenum Press, New York 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 CROW, D.R. (1994). Principles and applications of Electrochemistry. 4th ed.. Blackie Academic and Professional, Glasgow KORITA, J, DVORAK, J., KAVAN, L. (1987). Principles of Electrochemistry. 2nd ed.. Wiley, Chichester Otra Bibliografía complementaria ZIELINSKY (2003). "Mathematics in Physical Chemistry". J. Chem. Education, 80(5), 580-581 SASTRE DE VICENTE, M., LÓPEZ FONSECA, J.M. (1993). Métodos voltamétricos. Cap. 1. . Universidade da Coruña SASTRE, M., SANTABALLA, J.A. (1989). "A note on the meaning of the electroneutrality condition for solutions". J.Chem.Education., 66(5), 403 SASTRE DE VICENTE, M. (1993). "Introducing probabilistic concepts in Chemistry: the preparation of a 10 e-24 M solution as a limit case". J.Chem. Education, 102(3), 675 ZIELINSKI, T.J. (1998). "Mathcad in the chemistry Curriculum". J. Chem. Education, 75(9), 1189-1190 SASTRE DE VICENTE, M. (2004). "The Concept of Ionic Strength Eighty Years After its Introduction in Chemistry". J. Chem. Education, 81(5) 750-753 ARCE, F., SASTRE DE VICENTE, M., SANTABALLA, J.A. (1986). Aspectos teórico-prácticos de la medida del pH. Universidad de Santiago de Compostela</p> |

## Recomendacións

### Materias que se recomenda ter cursado previamente

Física/610311101

Química Física/610311202

Introdución a Espectroscopia/610311304

Técnicas Experimentais en Química Física/610311305

Cinetoquímica/610311405

### Materias que se recomenda cursar simultaneamente

Experimentación en Química Física/610311507

### 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