



Guía Docente				
Datos Identificativos				2018/19
Asignatura (*)	Química Física Avanzada		Código	610G01020
Titulación	Grao en Química			
Descriptores				
Ciclo	Período	Curso	Tipo	Créditos
Grao	1º cuatrimestre	Cuarto	Obrigatoria	6
Idioma	CastelánInglés			
Modalidade docente	Presencial			
Prerrequisitos				
Departamento	Química			
Coordinación	Iglesias Martínez, Emilia	Correo electrónico	emilia.iglesias@udc.es	
Profesorado	Brandařík Lendoiro, María Isabel Iglesias Martínez, Emilia	Correo electrónico	i.brandarik@udc.es emilia.iglesias@udc.es	
Web	campusvirtual.udc.es			
Descripción xeral	<p><b>PALABRAS CLAVE:</b> interaccións iónicas e fenómenos de transporte molecular. Ecuación de velocidade e mecanismos de reacción. Teorías Cinetoquímicas. Catálise homoxénea. Introdución á cinética eletroquímica. Macromoléculas e colóides.</p> <p><b>DESCRICIÓN:</b> A Química Física Avanzada aborda o estudo fenomenolóxico das interaccións entre íons 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 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.
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 afins 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 enfrentarse.

Resultados da aprendizaxe	
Resultados de aprendizaxe	Competencias do título



Metodolóxicas:		A3 A4 A10 A19 A20 A22 A23 A27	B1 B3 B4	C3
	- Ser capaz de planificar, proxectar e realizar experimentos relacionados co transporte de materia e de carga.	A4		
	- Ser capaz de proponer e elaborar un estudo cinético dunha reacción química.	A10		
	- Aplicación de programs informáticos sinxelos para o análise cuantitativo dos datos cinéticos.	A19		
	- Interpretación dos resultados en base a un mecanismo de reacción.	A20		
	- Simulación / predicción de datos non publicados partindo da ecuación de velocidad.	A22 A23 A27		
Conceptual:		A1 A4 A10 A14	B3	
	- Coñecemento das interaccións interiônicas 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.			
Actitudinales:		A22 A23 A25 A27	B1 B3 B4	C3
	- Presentar informes axeitados dun estudio experimental	A23		
	- Analizar e criticar estudos cinéticos publicados de dificultade baixa.	A25		
		A27		

## Contidos

Temas	Subtemas
Interaccións iónicas e moleculares	<ul style="list-style-type: none"><li>· Interaccións entre ións en disolución: coeficiente de actividad. Lei de Debye-Hückel. Forza iónica.</li><li>· As interaccións entre as moléculas. Momento dipolar. Polarizabilidade: Clausius-Mossotti. Interaccións dipolares. Interacción hidrofóbica: autoaggregation 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>· Ecuacions 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 velocidad e mecanismo de reacción	<ul style="list-style-type: none"><li>· Ecuación integrada de velocidad. 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, reacciones consecutivas.</li><li>· Aproximación do estado estacionario.</li><li>· Mecanismos de reacción, reacción elemental. deducción de mecanismos de reaction.</li></ul>
Teorías cinetoquímicas e aplicaciones	<ul style="list-style-type: none"><li>· Teoría de colisiones: factor de frecuencias</li><li>· Teoría do complexo activado: aproximación según a Termodinámica Estadística e según la Termodinámica clásica. Curvas de enerxía potencial</li><li>· Reacciones en fase gas: mecanismo de Lindeman</li><li>· Reacciones en disolución. Reacciones controladas pola difusión dos reactivos.</li><li>· Reacciones fotoquímicas</li></ul>



Catálise	<ul style="list-style-type: none"> <li>· Catálise homoxénea, heteroxénea e microheteroxénea</li> <li>· Mecanismo xeral de catálise: ecuacions de velocidade</li> <li>· Catálisis homoxénea: catálise nucleófila, catálise ácido-base</li> <li>· Correlacionas de enerxía libre</li> <li>· Catálise microheteroxénea: catálise micelar; catálise enzimática.</li> </ul>
Introducción a cinética electroquímica	<ul style="list-style-type: none"> <li>· Reacciones electroquímicas: aspectos singulares</li> <li>· Interfase electrodo-disolución: modelo de Gouy-Chapman</li> <li>· Velocidad 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 ecuaciones de velocidad e procesos de catálise.</li> </ul>

## Planificación

Metodoloxías / probas	Competencias	Horas presenciais	Horas non presenciais / traballo autónomo	Horas totais
Sesión maxistral	A25 A27 B3	21	42	63
Seminario	A1 A4 A10 A14 A20 B1 B3	7	28	35
Prácticas de laboratorio	A19 A20 A22 A23 A25 A27 B1 B3 B4 C3	20	20	40
Presentación oral	A20 A27 B3 C3 C6	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	Descripción
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 cuestions, 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 disponible con antelación. O alumno será quien 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 mismos en grupo. (Opción alternativa a elaboración do Informe escrito)
Proba mixta	? Resolución de cuestiós 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 cuestiós conceptuais.

## Atención personalizada

Metodoloxías	Descripción



Sesión maxistral	Recoméndase o uso das titorías individuais para a súa orientación na resolución das dúbidas, cuestiós 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 calquier tipo de dúbidas sobre a asignatura no horario de atención establecido.
Seminario	
Prácticas de laboratorio	

Avaliación			
Metodoloxías	Competencias	Descripción	Cualificación
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 segundo os modelos introducidos e explicación dos mesmos en base a modelos teóricos.  ? A entrega dun informe de laboratorio ou exposición dos resultados que reflecta os conceptos anteriores é necesaria.  ? Na avaliación desta actividade é tido en conta o traballo de laboratorio, os resultados obtidos e o informe preparado (escrito ou exposición oral).	10
Proba mixta	A1 A3 A4 A10 A14 A20	? A realización da proba escrita consta de cuestiós 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 (segunda oportunidade).  ? De non superar as prácticas e o examen final, ainda que a media sexa superior a 5, a calificación que figure Acta será "suspenso".  ? O alumno obterá a calificación de Non Presentado cando non faga as prácticas de laboratorio e, por tanto, tampouco se presente a proba mixta.  ? O proceso de enseñanza-aprendizaxe refierese a un curso académico, po lo que, nos sucesivos cursos académicos o alumno vuelve a comenzar de cero.	80
Presentación oral	A20 A27 B3 C3 C6	? Exposición e análise crítica dos resultados das prácticas de laboratorio.  ? Calidade da información producida na presentación e as habilidades mostradas na comunicación.  ? Capacidade para defender e contrastar os seus resultados	10

## Observacións avaliación

- A asistencia a totalidade das prácticas de laboratorio e a entrega do correspondente Informe son actividades obligatorias, tanto paro o alumno de matrícula a tempo parcial, como a tempo completo.
- A asistencia os seminarios e obligatoria pos alumnos de primeira matrícula 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	- P. W. Atkins, J. de Paula (2008). Química Física, 8 <sup>a</sup> Ed. . Panamericana - Espenson J. H. (1995). Chemical kinetics and reaction mechanisms 2 <sup>a</sup> 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	- 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). Fisicoquímica 5 <sup>a</sup> 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. 2 <sup>a</sup> 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 recomienda conocer 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