



Guía Docente			
Datos Identificativos			2018/19
Asignatura (*)	Química Física Avanzada	Código	610G01020
Titulación			
Descriptores			
Ciclo	Período	Curso	Tipo
Grao	1º cuatrimestre	Cuarto	Obrigatoria
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.brandariz@udc.es emilia.iglesias@udc.es
Web	campusvirtual.udc.es		
Descripción xeral	<p>PALABRAS CLAVE: interaccións iónicas e fenómenos de transporte molecular. Ecuación de velocidad e mecanismos de reacción. Teorías Cinetoquímicas. Catálise homoxénea. Introdución á cinética eletroquímica. Macromoléculas e colóides.</p> <p>DESCRICIÓN: 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 velocidad 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 B1 C3
<ul style="list-style-type: none">· Ser capaz de planificar, proxeccar e realizar experimentos relacionados co transporte de materia e de carga.· Ser capaz de proponer 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 velocidad.			A4 B3
Conceptual:			A10 B4
<ul style="list-style-type: none">· Coñecemento das interaccións interiônicas 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. Entender e coñecer os factores que poden modificar a velocidade dunha reacción.· Comprender o proceso de catálise e súa relación coa activación química, fotoquímica ou electroquímica.			A19 A20 A22 A23 A27
Actitudinais:			A1 B3
<ul style="list-style-type: none">· Presentar informes axeitados dun estudo experimental· Analizar e criticar estudos cinéticos publicados de dificultade baixa.			A22 B1 C3
			A23 B3 C6
			A25 B4
			A27



Contidos	
Temas	Subtemas
Interaccións iónicas e moleculares	<ul style="list-style-type: none">· Interaccións entre ións en disolución: coeficiente de actividad. Lei de Debye-Hückel. Forza iónica.· As interaccións entre as moléculas. Momento dipolar. Polarizabilidade: Clausius-Mossotti. Interaccións dipolares. Interacción hidrofóbica: autoagregation e conformación molecular.· Colóides: micelas directa e inversa, membranas biolóxicas.· Macromoléculas
Fenómenos de transporte	<ul style="list-style-type: none">· Ecuacions fenomenolóxicas. Fluxo. Difusión. Lei de Fick. Ecuación de Stokes-Einstein.· Conductividade térmica· Conductividade eléctrica: Teoría de Debye-Huckel-Onsager.· Viscosidade
Ecuación de velocidad e mecanismo de reacción	<ul style="list-style-type: none">· 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.· Esquemas complexos de reacción: reaccións paralelas, reaccións reversibles, reacciones consecutivas.· Aproximación do estado estacionario.· Mecanismos de reacción, reacción elemental. deducción de mecanismos de reaction.
Teorías cinetiquímicas e aplicaciones	<ul style="list-style-type: none">· Teoría de colisiones: factor de frecuencias· Teoría do complexo activado: aproximación según a Termodinámica Estadística e según la Termodinámica clásica. Curvas de enerxía potencial· Reacciones en fase gas: mecanismo de Lindeman· Reacciones en disolución. Reacciones controladas pola difusión dos reactivos.· Reacciones fotoquímicas
Catálise	<ul style="list-style-type: none">· Catálise homoxénea, heteroxénea e microheteroxénea· Mecanismo xeral de catálise: ecuacions de velocidad· Catálisis homoxénea: catálise nucleófila, catálise ácido-base· Correlacions de enerxía libre· Catálise microheteroxénea: catálise micelar; catálise enzimática.
Introducción a cinética electroquímica	<ul style="list-style-type: none">· Reacciones electroquímicas: aspectos singulares· Interfase electrodo-disolución: modelo de Gouy-Chapman· Velocidad 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 ecuacions de velocidad 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	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 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 discussión 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 alternative 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	
Presentación oral	Os alumnos a tempo parcial ou con dispensa académica de asistencia disporán de titorías tanto presenciais como por correo electrónico, sempre que o necesiten. Antes de realizar o traballo experimental, o alumno fará un guión do artigo científico que resume a experiencia que vai reporducir. Durante o desenrollo 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.

Avaliación			
Metodoloxías	Competencias / Resultados	Descripción	Cualificación



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 segundo 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 reflicta 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 (escrito ou exposición oral).</p>	10
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 (segunda oportunidade).</p> <p>? De non superar as prácticas e o examen final, ainda que a media sexa superior a 5, a calificación que figure Acta será "suspenso".</p> <p>? O alumno obterá a calificación de Non Presentado cando non faga as prácticas de laboratorio e, por tanto, tampouco se presente a proba mixta.</p> <p>? O proceso de enseñanza-aprendizaxe refierease a un curso académico, po lo que, nos sucesivos cursos académicos o alumno vuelve a comenzar de cero.</p>	80
Presentación oral	A20 A27 B3 C3 C6	<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 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	<ul style="list-style-type: none"> - P. W. Atkins, J. de Paula (2008). Química Física, 8^a Ed.. Panamericana - Espenson J. H. (1995). Chemical kinetics and reaction mechanisms 2^a 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). Fisicoquímica 5^a 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^a 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