Guia docente				
Datos Identificativos				2019/20
Asignatura (*)	Química Física Avanzada		Código	610G01020
Titulación	Grao en Química			
Descriptores				
Ciclo	Periodo	Curso	Tipo	Créditos
Grado	1º cuatrimestre	Cuarto	Obligatoria	6
Idioma	CastellanoInglés			
Modalidad docente	Presencial			
Prerrequisitos				
Departamento	Química			
Coordinador/a	Iglesias Martinez, Emilia		Correo electrónico	emilia.iglesias@udc.es
Profesorado	Brandariz Lendoiro, Maria Isabel Iglesias Martinez, Emilia		Correo electrónico	i.brandariz@udc.es emilia.iglesias@udc.es
Web	campusvirtual.udc.es			
Descripción general	DESCRIPTORES: Interacciones iónicas y moleculares Fenómenos de transporte. Ecuación de velocidad y mecanismos de reacción. Teorías cinetoquímicas. Catálisis homogénea. Introducción a la cinética electroquímica. Macromoléculas y coloides. DESCRIPCIÓN: Química Física Avanzada aborda el estudio fenomenológico de las interacciones entre iones y moléculas, las cuales permiten comprender la configuración de macromoléculas de interés químico y biológico. Los fenómenos de transporte en disolución hacen posible la caracterización de macromoléculas y son fundamentales en la aplicación de ciertas técnicas al estudio cinético de reacciones. La Cinética Química introduce la variable tiempo en el estudio de una reacción química, analizando los factores que modifican su velocidad con el fin de deducir la ecuación de velocidad para finalmente proponer un mecanismo de reacción que interprete a nivel molecular la reacción macroscópica observada.			

Competencias del título	
Código	Competencias del título
A1	Utilizar la terminología química, nomenclatura, convenios y unidades.
A3	Conocer las características de los diferentes estados de la materia y las teorías empleadas para describirlos.
A4	Conocer los tipos principales de reacción química y sus principales características asociadas.
A10	Conocer la cinética del cambio químico, incluyendo la catálisis y los mecanismos de reacción.
A14	Demostrar el conocimiento y comprensión de conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química.
A19	Llevar a cabo procedimientos estándares y manejar la instrumentación científica.
A20	Interpretar los datos procedentes de observaciones y medidas en el laboratorio.
A22	Planificar, diseñar y desarrollar proyectos y experimentos.
A23	Desarrollar una actitud crítica de perfeccionamiento en la labor experimental.
A25	Relacionar la Química con otras disciplinas y reconocer y valorar los procesos químicos en la vida diaria.
A27	Impartir docencia en química y materias afines en los distintos niveles educativos.
B1	Aprender a aprender.
B3	Aplicar un pensamiento crítico, lógico y creativo.
B4	Trabajar de forma autónoma con iniciativa.
C3	Utilizar las herramientas básicas de las tecnologías de la información y las comunicaciones (TIC) necesarias para el ejercicio de su profesión y para el aprendizaje a lo largo de su vida.
C6	Valorar críticamente el conocimiento, la tecnología y la información disponible para resolver los problemas con los que deben enfrentarse.

Resultados de aprendizaje	
Resultados de aprendizaje	Competencias del título

Metodológicas: ·Ser capaces de planificar, diseñar, y realizar experimentos relacionados con el transporte de materia y transporte de carga. · Ser capaces de plantear y diseñar el estudio cinético de una reacción química. · Aplicación de programas informáticos sencillos al análisis cuantitativo de datos cinéticos. · Interpretación de los resultados en base a un mecanismo de reacción. · Simulación / predicción de datos inéditos a partir de la ecuación de velocidad	A3 A4 A10 A19 A20 A22 A23 A27	B1 B3 B4	C3
Conceptual: · Conocimiento de las interacciones interiônicas e inter- o intramoleculares y su relación con los fenómenos de asociación, auto-agregación o conformación molecular. · Manejar los métodos propios de la cinética química. Interpretación a nivel molecular (mecanicista) de las reacciones químicas. Entender y conocer los factores que pueden modificar la velocidad de las reacciones químicas. · Comprender el proceso de catálise y su relación con la activación química, fotoquímica y electroquímica.	A1 A4 A10 A14	B3	
Actitudinales: ·Presentar informes adecuados de un estudio cinético experimental ·Analizar y criticar estudios cinéticos publicados de dificultad baja. ·Planificar y desarrollar experimentos sencillos	A22 A23 A25 A27	B1 B3 B4	C3 C6

Contenidos	
Tema	**Subtema**
Interacciones iónicas ymoleculares	· Interacciones entre iones en disolución: coeficiente de actividade. Lei de Debye-Hückel. Fuerza iónica. · Interacciones intermoleculares. Momento dipolar. Polarizabilidade: Clausius-Mossotti. Interacciones dipolares. Interacción hidrofóbica: autoagregation y conformación molecular. · Coloides: micelas directa e inversas, membranas biológicas. · Macromoléculas
Fenómenos de transporte	· Ecuaciones fenomenológicas. Flujo. Difusión. Ley de Fick. Ecuación de Stokes-Einstein. · Conductividad térmica · Conductividad eléctrica: Teoría de Deby-Huckel-Onsager. · Viscosidad
Ecuación de velocidad y Mecanismos de reacción	· Ecuaciones integradas de velocidad. Método de velocidades iniciales. Orden de reacción y constante de velocidad. Reacción estequiométrica. Método de aislamiento. Relación entre concentración y propiedad física. Técnicas experimentales · Esquemas de reacción complejos: reacciones paralelas, reversibles y consecutivas. · Aproximación del estado estacionario. · Mecanismos de reacción: rreacción elemental. Deducción de mecanismos de reacción
Teorías cinetoquímicas y aplicaciones	· Teoría de colisiones: factor de frecuencias · Teoría del complejo activado: aproximación según la Termodinámica Estadística y según la Termodinámica clásica. Curvas de energía potencial · Reacciones en fase gas: mecanismo de Lindeman ·Reacciones en disolución. Reacciones con control por difusión. · Reaccions fotoquímicas

Catálisis	· Catálisis homogénea, heterogénea y microheterogénea · Mecanismo general de catálisis: ecuaciones de velocidad · Catálisis homogénea: catálisis nucleófila, catálisis ácido-base · Correlaciones de energía libre: ecuación de Swain-Scott, ley de Bronsted, correlaciones de Hammett, correlaciones de Taft · Catálisis microheterogénea: catálisis micelar; catálisis enzimática.
Introducción a la cinética electroquímica	· Reacciones electroquímicas: aspectos singulares · Interfase electrodo-disolución: modelo de Gouy-Chapman · Velocidad de transferencia de carga. Ecuación de Butler-Volmer · Voltametría
Prácticas	· Experimentos de Laboratorio relacionados con fenómenos de transporte, determinación de ecuaciones de velocidade y procesos de catálisis.

Planificación				
Metodologías / pruebas	Competéncias	Horas presenciales	Horas no presenciales / trabajo autónomo	Horas totales
Sesión magistral	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
Prueba mixta	A1 A3 A4 A10 A14 A20	4	0	4
Atención personalizada		2	0	2
(*)Los datos que aparecen en la tabla de planificación són de carácter orientativo, considerando la heterogeneidad de los alumnos				

Metodologías	
Metodologías	Descripción
Sesión magistral	? En las clases de exposición se introducirán los conceptos, modelos, métodos y teorías de los contenidos fundamentales del programa de la asignatura. A través del campus virtual, el alumno dispondrá del material que complementa la clase. La lectura previa de los temas discutidos en clase, sin duda, redunda en un mejor rendimiento y facilita la interacción alumno-profesor.
Seminario	? Esta actividad se llevará a cabo en grupo reducido. El desarrollo de los seminarios se basa en el trabajo personal y en la participación activa del alumno. La relación de ejercicios, preguntas y/o casos que se van a trabajar en cada sesión de seminario estará disponible en el Aula virtual con antelación.
Prácticas de laboratorio	? Se realizarán experimentos relacionados con los conceptos abordados durante el curso . El alumno, con ayuda del profesor, intentará reproducir experimentos de laboratorio sencillos. Cada alumno elaborará un informe o una exposición oral sobre el trabajo de laboratorio, siguiendo las orientaciones del profesor. Será necesario realizar las prácticas de laboratorio para aprobar la asignatura.
Presentación oral	? Presentación de los resultados obtenidos en las prácticas de laboratorio utilizando las tecnologías de la información y comunicación. Debate y crítica de los mismos en grupo. (Opción alternativa a la presentación de Informe escrito)
Prueba mixta	? Resolución de cuestiones de teoría y ejercicios relacionados con los temas abordados en las clases expositivas, en las prácticas de laboratorio y en los seminarios. El alumno debe demostrar de forma independiente y en un período de tiempo predefinido, los conocimientos adquiridos y la capacidad de resolver ejercicios y/o cuestiones conceptuales, así como la crítica de sus resultados.

Atención personalizada

Metodologías	Descripción
Sesión magistral Seminario Prácticas de laboratorio Presentación oral	Se recomienda el uso de tutorías individuales en la resolución de las cuestiones y conceptos que no quedaron suficientemente claros, tanto en lo que respecta al desarrollo de la teórica como de los seminarios, prácticas de laboratorio o en la preparación de la prueba final. Los profesores estarán disponibles para resolver cualquier pregunta sobre los contenidos de la asignatura en el horario establecido. Los estudiantes con dispensa académica dispondrán de tutorías tanto presenciales como por correo electrónico, siempre que sea necesario. Antes de realizar el trabajo experimental, el estudiante hará un resumen del artículo científico que recoge la experiencia que va a reporducir. Durante el desarrollo del experimento se asesora al alumno en las complicaciones que puedan surgir. Después de la misma, el profesor guiará al estudiante en la interpretación de los resultados, basándose en los modelos teóricos desarrollados en el aula para el tratamiento cuantitativo de los resultados.

Evaluación			
Metodologías	Competéncias	Descripción	**Calificación**
Prácticas de laboratorio	A19 A20 A22 A23 A25 A27 B1 B3 B4 C3	? Reflejan la destreza y capacidad del alumno en la planificación, diseño y desarrollo de experimentos sencillos. ? Ensayo de diferentes técnicas en la caracterización de sistemas o en el seguimiento de procesos de reacción. ? Informe de laboratorio que refleje el tratamiento cuantitativo de los resultados experimentales y su explicación en base a modelos teóricos. ? En la evaluación de esta actividad se tiene en cuenta el trabajo de laboratorio, los resultados obtenidos y el Informe elaborado (escrito o como presentación oral).	10
Prueba mixta	A1 A3 A4 A10 A14 A20	? Prueba escrita para responder a cuestiones teóricas y ejercicios relacionados con los contenidos de las sesiones magistrales, los seminarios y las prácticas. ? Se requiere realizar las prácticas y aprobar la prueba escrita para superar la asignatura. La calificación obtenida en una actividad superada se mantendrá únicamente en las restantes convocatorias del curso académico (segunda oportunidad). ? De no superar la prueba mixta, aunque la media con la nota de prácticas sea superior a 5, la calificación numérica que figure en el Acta será la puntuación obtenida en la prueba mixta. ? El alumn@ obtendrá la calificación de No Presentado cuando no realice las prácticas y, por tanto, tampoco se presente a la prueba mixta. ? El proceso de enseñanza-aprendizaje se refiere a un curso académico, por lo que, en los sucesivos cursos académicos el alumno vuelve a comenzar de cero.	80
Presentación oral	A20 A27 B3 C3 C6	? Exposición y análisis crítico de los resultados de las prácticas de laboratorio. ? Calidad de la información elaborada en la presentación y de las habilidades mostradas en la comunicación. ? Capacidad para defender y contrastar sus resultados	10

Observaciones evaluación
-La asistencia a la totalidad de las prácticas de laboratorio y la entrega del correspondiente Informe son obligatorios. -La asistencia a seminarios no es obligatoria para el alumno con dispensa académica. Se tendrá en cuenta la participación activa del alumno en la calificación final. -Para superar la asignatura será necesario obtener en la prueba mixta una nota no inferior a 5.0 sobre 10 (4.0 sobre 8) y alcanzar una nota mínima de 5.0 en la suma proporcional de todas las actividades. -La calificación de matrícula se otorga preferentemente en la primera oportunidad. -Segunda oportunidad: repetición de la prueba mixta sobre contenidos de los seminarios, prácticas y clases de teoría.

Fuentes de información	
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
Complementária	- 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 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

Recomendaciones
Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente
Química General 1/610G01007 Química General 2/610G01008 Química General 3/610G01009 Laboratorio de Química 1/610G01010 Química Física 1/610G01016 Química Física 2/610G01017 Química Física 3/610G01018 Experimentación en Química Física/610G01019
Asignaturas que se recomienda cursar simultáneamente
Asignaturas que continúan el temario
Otros comentarios
- Son necesarios los conocimientos de las asignaturas de Química y de Química Física -Saber redactar, sintetizar y presentar ordenadamente un trabajo. -Dominar la representación gráfica, regresión lineal con conocimientos básicos de estadística. -Utilizar a nivel de usuario herramientas básicas de informática: Excel, Word, Power Point. -Se recomienda conocer inglés con nivel medio de comprensión de lectura.

(*) La Guía Docente es el documento donde se visualiza la propuesta académica de la UDC. Este documento es público y no se puede modificar, salvo cosas excepcionales bajo la revisión del órgano competente de acuerdo a la normativa vigente que establece el proceso de elaboración de guías