



Guía Docente				
Datos Identificativos				2019/20
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.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 velocidade 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 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 afíns 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
Conceptual:	- Comprender as interaccións interiónicas 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.	A1 A4 A10 A14	B3
Actitudinales:	- Presentar informes axeitados dun estudo experimental - Analizar e criticar estudos cinéticos publicados de dificultade baixa.	A22 A23 A25 A27	B1 B3 B4

Contidos

Temas	Subtemas
Interaccións iónicas e moleculares	- Interaccións entre ións en disolución: coeficiente de actividad. Lei de Debye-Hückel. Forza iónica. - As interaccións entre moléculas. Momento dipolar. Polarizabilidade: Clausius-Mossotti. Interaccións dipolares. Interacción hidrofóbica: autoaggregation e conformación molecular. - Coloides: micelas directa e inversa, membranas biolóxicas. - Macromoléculas
Fenómenos de transporte	- Ecuaciones fenomenológicas. Fluxo. Difusión. Lei de Fick. Ecuación de Stokes-Einstein. - Conductividade térmica - Conductividade eléctrica: Teoría de Debye-Huckel-Onsager. - Viscosidad
Ecuación de velocidad e mecanismo de reacción	- 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, reversibles e consecutivas. - Aproximación do estado estacionario. - Mecanismos de reacción, reacción elemental. deducción de mecanismos de reaction.
Teorías cinetoquímicas e aplicacions	- 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 velocidade · Catálisis homoxénea: catálise nucleófila, catálise ácido-base · Correlacionas 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 ecuaciones de velocidad e procesos de catálise.

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 das titorías.
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 según os modelos teóricos e explicación dos mesmos. ? A entrega dun informe de laboratorio ou exposición dos resultados que reflecta os conceptos anteriores é obligatoria. ? 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 a proba mixta, ainda que a media coa nota de prácticas sexa superior a 5, a calificación numérica que figure na Acta será a puntuación obtida na proba mixta. ? O alumno obterá a cualificación de Non Presentado cando non faga as prácticas de laboratorio e, por tanto, tampouco se presente a proba mixta. ? O proceso de enseñanza-aprendizaxe refierease 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

Observaciós avaliación



- A asistencia a totalidade das prácticas de laboratorio e a entrega do correspondente Informe son actividades obligatorias pa todo o alumnado.
- A asistencia os seminarios non e obligatoria para o alumno con dispensa académica. A participación activa do alumno será tida en conta na nota final acadada.
- Para superar a asignatura será necesario obter na proba mixta unha nota non inferior a 5.0 sobre 10 (4 sobre 8) e acadar unha nota mínima de 5.0 na suma das calificacións de todas as actividades.
- 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). 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

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).
- Recoméndase coñecer inglés co nível 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

