



Guía Docente				
Datos Identificativos				2021/22
Asignatura (*)	Química Física Avanzada	Código	610G01020	
Titulación	Grao en Química			
Descritores				
Ciclo	Período	Curso	Tipo	Créditos
Grao	1º cuatrimestre	Cuarto	Obrigatoria	6
Idioma	CastelánInglés			
Modalidade docente	Híbrida			
Prerrequisitos				
Departamento	Química			
Coordinación	Iglesias Martinez, Emilia	Correo electrónico	emilia.iglesias@udc.es	
Profesorado	Brandariz Lendoiro, María Isabel	Correo electrónico	i.brandariz@udc.es	
	Iglesias Martinez, Emilia		emilia.iglesias@udc.es	
Web	campusvirtual.udc.es			
Descrición xeral	<p><b>PALABRAS CLAVE:</b> interaccións iónicas e fenómenos de transporte molecular. Ecuación de velocidade e mecanismos de reacción. Teorías Cinetoquímicas. Catálise homoxénea. Introducción á cinética eletroquímica. Macromoléculas e colóides.</p> <p>A Química Física Avanzada aborda o estudo fenomenolóxico das interaccións entre ións 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>			
Plan de continxencia	<ol style="list-style-type: none"><li>Modificacións nos contidos<ul style="list-style-type: none"><li>-Non se realizarán cambios</li></ul></li><li>Metodoloxías<ul style="list-style-type: none"><li>*Metodoloxías docentes que se manteñen:<ul style="list-style-type: none"><li>-Todas</li></ul></li><li>*Metodoloxías docentes que se modifican<ul style="list-style-type: none"><li>No caso de existiren problemas de aforo nos espazos designados para a realización de actividades presenciais, reservaranse espazos adicionais nos que os alumnos poidan seguir as actividades a través da plataforma TEAMS. No caso das actividades prácticas, os grupos desdobraranse para adaptarse á capacidade do laboratorio</li></ul></li></ul></li><li>Mecanismos de atención personalizada ao alumnado<ul style="list-style-type: none"><li>-Correo electrónico</li><li>-Fors de Moodle</li><li>-Teams</li></ul></li><li>Modificacións na avaliación:<ul style="list-style-type: none"><li>Non se contemplan modificacións</li></ul></li></ol> <p>*Observacións de avaliación:</p> <ol style="list-style-type: none"><li>Modificacións da bibliografía ou webgrafía<ul style="list-style-type: none"><li>-Non hay modificacións</li></ul></li></ol>			

## Competencias / Resultados do título

Código	Competencias / Resultados 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 afrontarse.

Resultados da aprendizaxe			
Resultados de aprendizaxe	Competencias / Resultados do título		
	A3	B1	C3
<b>Metodolóxicas:</b> <ul style="list-style-type: none"><li>Planificar, proxectar e realizar experimentos relacionados co transporte de materia e de carga.</li><li>Propoñer e elaborar un estudo cinético dunha reacción química.</li><li>Aplicación de programas informáticos sinxelos para o análise cuantitativo dos datos cinéticos.</li><li>Interpretación dos resultados en base a un mecanismo de reacción.</li><li>Simulación / predicción de datos non publicados partindo da ecuación de velocidade.</li></ul>	A4	B3	
	A10	B4	
	A19		
	A20		
	A22		
	A23		
	A27		
<b>Conceptual:</b> <ul style="list-style-type: none"><li>Comprender as interaccións interiónicas e inter- ou intramoleculares e a súa relación cos fenómenos de asociación, auto-agregación ou conformación molecular.</li><li>Manexar os métodos propios da cinética química. Interpretación a nivel molecular (mecanicista) das reaccións químicas.</li></ul> Entender e coñecer os factores que poden modificar a velocidade dunha reacción. <ul style="list-style-type: none"><li>Comprender o proceso de catálise e súa relación coa activación química, fotoquímica ou electroquímica.</li></ul>	A1	B3	
	A4		
	A10		
	A14		
<b>Actitudinais:</b> <ul style="list-style-type: none"><li>Presentar informes axeitados dun estudo experimental</li><li>Analizar e criticar estudos cinéticos publicados de dificultade baixa.</li></ul>	A22	B1	C3
	A23	B3	C6
	A25	B4	
	A27		

Contidos	
Temas	Subtemas
Interaccións iónicas e moleculares	<ul style="list-style-type: none"><li>Interaccións entre ións en disolución: coeficiente de actividade. Lei de Debye-Hückel. Forza iónica.</li><li>As interaccións entre moléculas. Momento dipolar. Polarizabilidade: Clausius-Mossotti. Interaccións dipolares. Interacción hidrofóbica: autoagregación e conformación molecular.</li><li>Coloides: micelas directas e inversas, membranas biolóxicas.</li><li>Macromoléculas</li></ul>



Fenómenos de transporte	<ul style="list-style-type: none"> <li>· Ecuacións 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 velocidade e mecanismo de reacción	<ul style="list-style-type: none"> <li>· Ecuación integrada de velocidade. 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, reversibles e consecutivas.</li> <li>· Aproximación do estado estacionario.</li> <li>· Mecanismos de reacción, reacción elemental. deducción de mecanismos de reaction.</li> </ul>
Teorías cinetoquímicas e aplicacións	<ul style="list-style-type: none"> <li>· Teoría de colisións: 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>· Reaccións en fase gas: mecanismo de Lindeman</li> <li>· Reaccións en disolución. Reaccións controladas pola difusión dos reactivos.</li> <li>· Reaccións fotoquímicas</li> </ul>
Catálise	<ul style="list-style-type: none"> <li>· Catálise homoxénea, heteroxénea e microheteroxénea</li> <li>· Mecanismo xeral de catálise: ecuacións de velocidade</li> <li>· Catálise homoxénea: catálise nucleófila, catálise ácido-base</li> <li>· Correlacións de enerxía libre: ecuacións de Bronsted, Hammett, Taft</li> <li>· Catálise microheteroxénea: catálise micelar e enzimática.</li> <li>· Catálise heteroxénea: isoterma de Langmuir. Ecuacións de velocidade</li> </ul>
Introducción a cinética electroquímica	<ul style="list-style-type: none"> <li>· Reaccións electroquímicas: aspectos singulares</li> <li>· Interfase electrodo-disolución: modelo de Gouy-Chapman</li> <li>· Velocidade 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 ecuacións de velocidade e procesos de catálise.</li> </ul>

### Planificación

Metodoloxías / probas	Competencias / Resultados	Horas lectivas (presenciais e virtuais)	Horas traballo autónomo	Horas totais
Sesión maxistral	A4 A10 A25 A27 B3	21	50	71
Seminario	A1 A4 A10 A14 B1 B3 C6	7	28	35
Prácticas de laboratorio	A27 A25 A23 A22 A20 A19 B1 B3 B4 C3 C6	20	20	40
Proba mixta	A1 A3 A4 A10 A14 A20	4	0	4
Atención personalizada		0	0	0

\*Os datos que aparecen na táboa de planificación son de carácter orientativo, considerando a heteroxeneidade do alumnado

### Metodoloxías

Metodoloxías	Descrición
Sesión maxistral	Nas clases de exposición serán introducidos os conceptos, modelos, métodos e teorías dos contidos fundamentais do programa do curso.



Seminario	Contemplase coma unha actividade de docencia interactiva. Algúns conceptos serán enfatizados mediante o desenvolvemento detallado de exercicios estándar e resolveranse as dúbidas plantexadas polo alumno.
Prácticas de laboratorio	Realízanse experiencias relacionadas cos conceptos abordados no curso. Consta de dúas fases: A primeira inclúe a comprensión do/s experimento/s que se levará/n a cabo no laboratorio e dos conceptos teóricos e técnicas relacionadas, para logo comezar co desenvolvemento do traballo experimental: planificación do experimento, a súa execución e análise dos resultados obtidos. A segunda consiste na elaboración do Informe de resultados, que se avaliará tendo en conta a súa presentación, xustificación metodolóxica e interpretación, así como o comparación cos datos bibliográficos.
Proba mixta	Resolución de cuestións 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 cuestións conceptuais.

### Atención personalizada

Metodoloxías	Descrición
Seminario Prácticas de laboratorio	<p>Recoméndase o uso das titorías individuais para a súa orientación na resolución das dúbidas, cuestións 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 calquer tipo de dúbidas sobre a asignatura no horario de atención das titorías.</p> <p>Os alumnos con dispensa académica disporán de titorías tanto presenciais como por correo electrónico ou Teams, sempre que o necesiten.</p> <p>Antes de realizar o traballo experimental de laboratorio, o alumnado debe demostrar que comprende o artigo científico que describe a experiencia que vai reproducir. Durante o desenvolvemento do experimento, aconséllase o estudante sobre as complicacións que poden xurdir. Despois diso, o profesorado guiarán a cada alumno/a na interpretación dos resultados, baseándose nos modelos teóricos desenvolvidos na aula para o tratamento cuantitativo dos resultados</p>

### Avaliación

Metodoloxías	Competencias / Resultados	Descrición	Cualificación
Prácticas de laboratorio	A27 A25 A23 A22 A20 A19 B1 B3 B4 C3 C6	<p>Na avaliación desta actividade tense en conta o traballo de laboratorio e o Informe de resultados:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>-Entrevista no laboratorio, previa ao desenvolvemento do experimento, que reflicta a comprensión do sistema químico, a metodoloxía a aplicar, a técnica empregada e a seguridade necesaria.</li> <li>-Desenvolvemento do experimento no laboratorio: planificación, toma de datos e análise dos mesmos.</li> <li>-Informe de resultados que serán avaliados en termos de presentación, tratamento cuantitativo e explicación dos resultados en base a modelos teóricos.</li> </ul>	20



Proba mixta	A1 A3 A4 A10 A14 A20	<p>Proba escrita para responder a preguntas teóricas e resolver exercicios relacionados cos contidos das clases teóricas, seminarios e prácticas.</p> <p>É necesario realizar as prácticas e superar a proba mixta para superar a materia. A nota obtida nunha actividade superada manterase só nas restantes convocatorias do curso académico (segunda oportunidade).</p> <p>Se non se aproba a proba mixta, aínda que a nota media das actividades sexa superior a 5, a cualificación numérica que figura no Acta será a da proba mixta.</p> <p>O estudante obterá a nota de Non presentado cando non realice as prácticas e, polo tanto, tampouco se presente á proba final.</p> <p>Os estudantes que soliciten unha convocatoria anticipada para decembro rexeranse por esta mesma guía docente.</p>	80
-------------	-------------------------	--	----

### Observacións avaliación

-A asistencia a totalidade das prácticas de laboratorio e a entrega do correspondente Informe son actividades obrigatorias pa todo o alumnado.

-A asistencia os seminarios non e obrigatoria para o alumnado con dispensa académica. -Para superar a asignatura será necesario obter unha nota non inferior a 5.0 sobre 10 en todas as actividades evaluables. -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

<b>Bibliografía básica</b>	<ul style="list-style-type: none"><li>- P. W. Atkins, J. de Paula (2008). Química Física, 8ª Ed. . Panamericana</li><li>- Espenson J. H. (1995). Chemical kinetics and reaction mechanisms 2ª ed.. McGraw-Hill, New York.</li><li>- Laidler K. J. (1994). Chemical Kinetics . Harper and Row, New York.</li><li>- Bockris, J.O.M., Reddy, A K.N. (1998). Modern Electrochemistry 1. Ionics. 2nd ed.. Plenum Press, New York</li><li>- P. W. Atkins, J. de Paula (2010). Physical Chemistry, 9th Ed. . Oxford University Press</li></ul>
<b>Bibliografía complementaria</b>	<ul style="list-style-type: none"><li>- P. L. Brezonik (1994). Chemical Kinetics and Process Dynamic in Aquatic Systems.. Lewis Publishers</li><li>- P. Sanz Pedredo (1992). Físicoquímica para Farmacia y Biología.. Masson-Salvat Medicina</li><li>- R. A. Jackson (2004). Mechanism in Organic Reactions.. Royal Society of Chemistry (RSC)</li><li>- LEVINE I. N. (2004). Físicoquímica 5ª ed.. McGraw-Hill, Madrid</li><li>- KORITA, J, DVORAK, J., KAVAN, L. (1987). Principles of Electrochemistry. 2nd ed.. Wiley, Chichester</li><li>- BERRY R. S., RICE S. A., ROSS J. (2000). Physical Chemistry. 2ª ed.. Oxford University Press, New York</li><li>- J. BERTRAN-RUSCA, J. NUÑEZ-DELGADO Eds , (2002). Química Física, vol. II. Ariel Ciencia</li><li>- S. R. Logan (2000). Fundamentos de Cinética Química. Addison Wesley</li><li>- 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</li></ul>

### 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 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