



Guía Docente				
Datos Identificativos				2021/22
Asignatura (*)	Química Física Avanzada	Código	610G01020	
Titulación				
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>PALABRAS CLAVE: 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">Modificacións nos contidos<ul style="list-style-type: none">-Non se realizarán cambiosMetodoloxías<ul style="list-style-type: none">*Metodoloxías docentes que se manteñen:<ul style="list-style-type: none">-Todas*Metodoloxías docentes que se modifican<ul style="list-style-type: none">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 laboratorioMecanismos de atención personalizada ao alumnado<ul style="list-style-type: none">-Correo electrónico-Foros de Moodle-TeamsModificacións na avaliación:<ul style="list-style-type: none">Non se contemplan modificacións<ul style="list-style-type: none">*Observacións de avaliación:Modificacións da bibliografía ou webgrafía<ul style="list-style-type: none">-Non hay modificacións			

Competencias / Resultados do título	
Código	Competencias / Resultados do título



Resultados da aprendizaxe			
Resultados de aprendizaxe	Competencias / Resultados do título		
Metodolóxicas: <ul style="list-style-type: none"> · Planificar, proxectar e realizar experimentos relacionados co transporte de materia e de carga. · Ppropoñer e elaborar un estudo cinético dunha reacción química. · Aplicación de programs 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 velocidade. 	A3 A4 A10 A19 A20 A22 A23 A27	B1 B3 B4	C3
Conceptual: <ul style="list-style-type: none"> · 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. <ul style="list-style-type: none"> · Comprender o proceso de catálise e súa relación coa activación química, fotoquímica ou electroquímica. 	A1 A4 A10 A14	B3	
Actitudinales: <ul style="list-style-type: none"> · Presentar informes axeitados dun estudo experimental · Analizar e criticar estudos cinéticos publicados de dificultade baixa. 	A22 A23 A25 A27	B1 B3 B4	C3 C6

Contidos	
Temas	Subtemas
Interaccións iónicas e moleculares	<ul style="list-style-type: none"> · Interaccións entre ións en disolución: coeficiente de actividade. Lei de Debye-Hückel. Forza iónica. · As interaccións entre moléculas. Momento dipolar. Polarizabilidade: Clausius-Mossotti. Interaccións dipolares. Interacción hidrofóbica: autoagregación e conformación molecular. · Coloides: micelas directas e inversas, membranas biolóxicas. · Macromoléculas
Fenómenos de transporte	<ul style="list-style-type: none"> · Ecuacións fenomenolóxicas. Fluxo. Difusión. Lei de Fick. Ecuación de Stokes-Einstein. · Conductividade térmica · Conductividade eléctrica: Teoría de Debye-Huckel-Onsager. · Viscosidade
Ecuación de velocidade e mecanismo de reacción	<ul style="list-style-type: none"> · 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. · 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 aplicacións	<ul style="list-style-type: none"> · Teoría de colisións: factor de frecuencias · Teoría do complexo activado: aproximación según a Termodinámica Estadística e según la Termodinámica clásica. Curvas de enerxía potencial · Reaccións en fase gas: mecanismo de Lindeman · Reaccións en disolución. Reaccións controladas pola difusión dos reactivos. · Reaccións fotoquímicas



Catálise	<ul style="list-style-type: none"> · Catálise homoxénea, heteroxénea e microheteroxénea · Mecanismo xeral de catálise: ecuacions de velocidade · Catálise homoxénea: catálise nucleófila, catálise ácido-base · Correlacions de enerxía libre: ecuacións de Bronsted, Hammett, Taft · Catálise microheteroxénea: catálise micelar e enzimática. · Catálise heteroxénea: isoterma de Langmuir. Ecuacións de velocidade
Introducción a cinética electroquímica	<ul style="list-style-type: none"> · Reaccións electroquímicas: aspectos singulares · Interfase electrodo-disolución: modelo de Gouy-Chapman · Velocidade 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 ecuacións de velocidade e procesos de catálise.

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. Alguns 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">-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.-Desenvolvemento do experimento no laboratorio: planificación, toma de datos e análise dos mesmos.-Informe de resultados que serán avaliados en termos de presentación, tratamento cuantitativo e explicación dos resultados en base a modelos teóricos.	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 cualificación 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- P. W. Atkins, J. de Paula (2010). Physical Chemistry, 9th Ed. . Oxford University Press
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). Físicoquímica 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 Electrodictics.. 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 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