



Guía Docente				
Datos Identificativos				2022/23
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	Canle López, Moisés	Correo electrónico	moises.canle@udc.es	
	Iglesias Martinez, Emilia		emilia.iglesias@udc.es	
	Santaballa Lopez, Juan Arturo		arturo.santaballa@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>			

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 enfrontarse.

Resultados da aprendizaxe	
Resultados de aprendizaxe	Competencias do título



<p>Metodolóxicas:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>· Planificar, proxectar e realizar experimentos relacionados co transporte de materia e de carga.</li> <li>· Ppropoñer e elaborar un estudo cinético dunha reacción química.</li> <li>· Aplicación de programs 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>	A3 A4 A10 A19 A20 A22 A23 A27	B1 B3 B4	C3
<p>Conceptual:</p> <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. Entender e coñecer os factores que poden modificar a velocidade dunha reacción.</li> <li>· Comprender o proceso de catálise e súa relación coa activación química, fotoquímica ou electroquímica.</li> </ul>	A1 A4 A10 A14	B3	
<p>Actitudinales:</p> <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 A23 A25 A27	B1 B3 B4	C3 C6

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: ecuacions 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	Horas presenciais	Horas non presenciais / 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	A19 A20 A22 A23 A25 A27 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	Experiments related to the concepts addressed in the course are carried out. It consists of two stages: The first includes the understanding of the experiment/s to be carried out in the lab (its theoretical basis and related techniques), and the development of the experimental work (planning, execution and analysis of the obtained results). The second stage involves the delivery of the corresponding Report. Presentation (including oral presentation), methodological justification and interpretation, as well as comparison with bibliographic data will be assessed.
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	Descrición	Cualificación
Prácticas de laboratorio	A19 A20 A22 A23 A25 A27 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). Electroquímica Moderna. . Reverté. 1980</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 Electrodictics.. 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