



Guía docente				
Datos Identificativos				2022/23
Asignatura (*)	Química Física Avanzada	Código	610G01020	
Titulación	Grao en Química			
Descriptorios				
Ciclo	Periodo	Curso	Tipo	Créditos
Grado	1º cuatrimestre	Cuarto	Obligatoria	6
Idioma	CastellanoInglés			
Modalidad docente	Híbrida			
Prerrequisitos				
Departamento	Química			
Coordinador/a	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			
Descripción general	<p>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.</p> <p>La 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.</p>			

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



<p>Metodológicas:</p> <ul style="list-style-type: none"> -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 	<p>A3 A4 A10 A19 A20 A22 A23 A27</p>	<p>B1 B3 B4</p>	<p>C3</p>
<p>Conceptual:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Conocimiento de las interacciones interiónicas 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 catálisis y su relación con la activación química, fotoquímica y electroquímica. 	<p>A1 A4 A10 A14</p>	<p>B3</p>	
<p>Actitudinales:</p> <ul style="list-style-type: none"> -Presentar informes adecuados de un estudio cinético experimental -Analizar y criticar estudios cinéticos publicados de dificultad baja. -Planificar y desarrollar experimentos sencillos 	<p>A22 A23 A25 A27</p>	<p>B1 B3 B4</p>	<p>C3 C6</p>

Contenidos	
Tema	Subtema
Interacciones iónicas y moleculares	<ul style="list-style-type: none"> - Interacciones entre iones en disolución: coeficiente de actividad. Ley de Debye-Hückel. Fuerza iónica. - Interacciones intermoleculares. Momento dipolar. Polarizabilidad: ecuación de Clausius-Mossotti. Interacciones dipolares. Interacción hidrofóbica: autoagregación y conformación molecular. - Coloides: micelas directa e inversas, membranas biológicas. - Macromoléculas
Fenómenos de transporte	<ul style="list-style-type: none"> - Ecuaciones fenomenológicas. Flujo. Difusión. Ley de Fick. Ecuación de Stokes-Einstein. - Conductividad térmica - Conductividad eléctrica: Teoría de Debye-Hückel-Onsager. - Viscosidad
Ecuación de velocidad y Mecanismos de reacción	<ul style="list-style-type: none"> - 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: reacción elemental. Deducción de mecanismos de reacción
Teorías cinetoquímicas y aplicaciones	<ul style="list-style-type: none"> - 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. - Reacciones fotoquímicas



Catálisis	<ul style="list-style-type: none"> · 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, ecuación de Brønsted, ecuación de Hammett, ecuación de Taft · Catálisis microheterogénea: catálisis micelar; catálisis enzimática. · Catálisis heterogénea: isoterma de Langmuir. Leyes de velocidad.
Introducción a la 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 y procesos de catálisis.

Planificación				
Metodologías / pruebas	Competencias	Horas presenciales	Horas no presenciales / trabajo autónomo	Horas totales
Sesión magistral	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
Prueba mixta	A1 A3 A4 A10 A14 A20	4	0	4
Atención personalizada		0	0	0

(*) 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.
Seminario	Se contempla como actividad de docencia interactiva. Se incidirá en determinados conceptos, mediante el desarrollo detallado de ejercicios estándar y se resolverán dudas planteadas por el alumnado
Prácticas de laboratorio	Se realizan experimentos relacionados con los conceptos abordados en el curso. Consta de dos fases: La primera incluye la comprensión del experimento/s que le corresponde realizar en el Laboratorio y los conceptos teóricos y las técnicas relacionados, para, seguidamente, comenzar con el desarrollo del trabajo experimental: planificación del experimento, ejecución del mismo y análisis de los resultados obtenidos. La segunda consiste en la elaboración del Informe de resultados, en el que se valorará la presentación, justificación metodológica e interpretación, así como la comparación con resultados bibliográficos.
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 alumnado 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



Seminario Prácticas de laboratorio	<p>Se recomienda el uso de tutorías individuales para la resolución de cuestiones y aclaración de conceptos, tanto en lo que respecta al desarrollo de la teoría como de los seminarios, prácticas de laboratorio o en la preparación de la prueba final. El profesorado estará disponible para resolver cualquier pregunta sobre los contenidos de la asignatura en el horario establecido.</p> <p>El estudiantado con dispensa académica dispondrán de tutorías tanto presenciales como por correo electrónico o Teams, siempre que sea necesario.</p> <p>Antes de realizar el trabajo experimental de laboratorio, el/la estudiante debe demostrar la comprensión del artículo científico que recoge la experiencia que va a reproducir. Durante el desarrollo del experimento se asesora al alumno o alumna en las complicaciones que puedan surgir. Después de la misma, el profesorado guiará a cada estudiante en la interpretación de los resultados, basándose en los modelos teóricos desarrollados en el aula para el tratamiento cuantitativo de los resultados.</p>
---------------------------------------	--

Evaluación			
Metodologías	Competencias	Descripción	Calificación
Prácticas de laboratorio	A19 A20 A22 A23 A25 A27 B1 B3 B4 C3 C6	<p>En la evaluación de esta actividad se tiene en cuenta el trabajo de laboratorio y el Informe de resultados:</p> <ul style="list-style-type: none">-Entrevista en el Laboratorio, previa al desarrollo del experimento, que refleje la comprensión del sistema químico, la metodología que se va a aplicar, la técnica utilizada y la seguridad necesaria.-Desarrollo del experimento en el Laboratorio: planificación, toma de datos y análisis.-Informe de resultados que se evaluará en cuanto a la presentación, el tratamiento cuantitativo y la explicación de los resultados en base a modelos teóricos.	20
Prueba mixta	A1 A3 A4 A10 A14 A20	<p>Prueba escrita para responder a cuestiones teóricas y resolver ejercicios relacionados con los contenidos de las sesiones magistrales, los seminarios y las prácticas.</p> <p>Se requiere realizar las prácticas y aprobar la prueba mixta para superar la asignatura. La calificación obtenida en una actividad superada se mantendrá únicamente en las restantes convocatorias del curso académico (segunda oportunidad).</p> <p>De no superar la prueba mixta, aunque la nota media de las actividades sea superior a 5, la calificación numérica que figure en el Acta será la de la prueba mixta.</p> <p>El alumno o alumna obtendrá la calificación de No Presentado cuando no realice las prácticas y, por tanto, tampoco se presente a la prueba final.</p> <p>Los estudiantes que soliciten convocatoria adelantada de diciembre se registrarán por esta misma Guía docente.</p>	80

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.
- Para superar la asignatura será necesario obtener una nota no inferior a 5.0 sobre 10 en todas las actividades evaluables.
- 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	<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). Electroquímica Moderna. . Reverté. 1980- P. W. Atkins, J. de Paula (2010). Physical Chemistry, 9th Ed. . Oxford University Press
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 Electrochemicals.. 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

Prerrequisitos:-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