



Guía Docente				
Datos Identificativos				2023/24
Asignatura (*)	Química Física Avanzada		Código	610G01020
Titulación				
Descriptorios				
Ciclo	Período	Curso	Tipo	Créditos
Grao	1º cuatrimestre	Cuarto	Obrigatoria	6
Idioma	CastelánInglés			
Modalidade docente	Presencial			
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	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. 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.			

Competencias do título	
Código	Competencias do título

Resultados da aprendizaxe				
Resultados de aprendizaxe			Competencias do título	
Metodolóxicas: - Planificar, proxectar e realizar experimentos relacionados co transporte de materia e de carga. - Propoñer e elaborar un estudo cinético dunha reacción química. - Aplicación de programas 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	B1	C3	
	A4	B3		
	A10	B4		
	A19			
	A20			
	A22			
	A23			
	A27			
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	B3		
	A4			
	A10			
	A14			
Actitudinais: - Presentar informes axeitados dun estudo experimental - Analizar e criticar estudos cinéticos publicados de dificultade baixa.	A22	B1	C3	
	A23	B3	C6	
	A25	B4		
	A27			



Contidos	
Temas	Subtemas
Interaccións iónicas e moleculares	· 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	· 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	· 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. dedución de mecanismos de reaction.
Teorías cinetoquímicas e aplicacións	· 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	· Catálise homoxénea, heteroxénea e microheteroxénea · Mecanismo xeral de catálise: ecuacións de velocidade · Catálise homoxénea: catálise nucleófila, catálise ácido-base · Correlacións 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	· Reaccións electroquímicas: aspectos singulares · Interfase electrodo-disolución: modelo de Gouy-Chapman · Velocidade de transferencia de carga. Ecuación de Butler-Volmer · Voltametría
Prácticas	· Experimentos de Laboratorio relacionados con fenómenos de transporte, determinación de ecuacións de velocidade e procesos de catálise.

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	Recoméndase o uso das tutorías 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 tutorías. Os alumnos con dispensa académica disporán de tutorías tanto presenciais como por correo electrónico ou Teams, sempre que o necesiten. 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

Avaliación			
Metodoloxías	Competencias	Descrición	Cualificación
Prácticas de laboratorio	A19 A20 A22 A23 A25 A27 B1 B3 B4 C3 C6	Na avaliación desta actividade tense en conta o traballo de laboratorio e o Informe de resultados: -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	Proba escrita para responder a preguntas teóricas e resolver exercicios relacionados cos contidos das clases teóricas, seminarios e prácticas. 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). 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. O estudante obterá a nota de Non presentado cando non realice as prácticas e, polo tanto, tampouco se presente á proba final. Os estudantes que soliciten unha convocatoria anticipada para decembro rexeranse por esta mesma guía docente.	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.-Os alumnos en réxime de adicación a tempo parcial ou en réxime de adicación parcial con dispensa académica de asistencia dispoñen de tutorías presenciais e/ou telemáticas (sempre que a complexidade da dúbida o permita) para resolver calquer dúbida que poida xurdir na preparación da asignatura.-A realización fraudulenta das probas de avaliación, unha vez comprobada directamente, implicará a calificación de suspenso na convocatoria na que se practique; o alumno ou alumna será calificada con "suspenso" (nota numérica 0) na correspondente convocatoria do curso académico, independentemente de que a faude se produza na primeira ou na segunda oportunidade, polo que, de ser o caso, mesmo se modificaría a calificación da primeira oportunidade, se fose necesario.

Fontes de información

Bibliografía básica	- 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
Bibliografía complementaria	- 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 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 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