



Guía Docente				
Datos Identificativos				2024/25
Asignatura (*)	Química Física Avanzada	Código	610G01020	
Titulación				
Descriptorios				
Ciclo	Período	Curso	Tipo	Créditos
Grao	1º cuatrimestre	Cuarto	Obrigatoria	6
Idioma	Castelán/Inglés			
Modalidade docente	Presencial			
Prerrequisitos				
Departamento	Química			
Coordinación	Iglesias Martinez, Emilia	Correo electrónico	emilia.iglesias@udc.es	
Profesorado	Iglesias Martinez, Emilia Santaballa Lopez, Juan Arturo	Correo electrónico	emilia.iglesias@udc.es arturo.santaballa@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>			

Competencias / Resultados do título	
Código	Competencias / Resultados do título

Resultados da aprendizaxe			
Resultados de aprendizaxe		Competencias / Resultados do título	
Metodolóxicas:		A3	B1 C3
· Planificar, proxectar e realizar experimentos relacionados co transporte de materia e de carga.		A4	B3
· Ppropoñer e elaborar un estudo cinético dunha reacción química.		A10	B4
· Aplicación de programs informáticos sinxelos para o análise cuantitativo dos datos cinéticos.		A19	
· Interpretación dos resultados en base a un mecanismo de reacción.		A20	
· Simulación / predicción de datos non publicados partindo da ecuación de velocidade.		A22	
		A23	
		A27	
Conceptual:		A1	B3
· Comprender as interaccións interiónicas e inter- ou intramoleculares e a súa relación cos fenómenos de asociación, auto-agregación ou conformación molecular.		A4	
· Manexar os métodos propios da cinética química. Interpretación a nivel molecular (mecanicista) das reaccións químicas.		A10	
Entender e coñecer os factores que poden modificar a velocidade dunha reacción.		A14	
· Comprender o proceso de catálise e súa relación coa activación química, fotoquímica ou electroquímica.			
Actitudinales:		A22	B1 C3
· Presentar informes axeitados dun estudo experimental		A23	B3 C6
· Analizar e criticar estudos cinéticos publicados de dificultade baixa.		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. dedución de mecanismos de reacción.</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 a 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	A1 A4 A10 A25 A27 B3	21	50	71
Seminario	A1 A14 A20 B1 B3	7	28	35
Prácticas de laboratorio	A19 A20 A22 A23 A25 A27 B1 B3 B4 C3 C6	20	20	40
Proba de resposta breve	A1 A3 A4 A10 A14	1	0	1



Proba obxectiva	A1 A3 A14 A20 B3	3	0	3
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; o traballo do alumno e fundamental. Algúns conceptos serán enfatizados mediante o desenvolvemento detallado de exercicios estándar e resolveranse as dúbidas plantexadas polo alumno.
Prácticas de laboratorio	Realizaranse experimentos relacionados cos conceptos abordados no curso. Consta de dúas fases: A primeira inclúe a comprensión do/s experimento/s que lle corresponde realizar no Laboratorio e os conceptos teóricos e as técnicas empregadas, para, de seguido, comezar co desenrolo do traballo experimental: planificación do experimento, execución do mesmo e análise dos resultados obtidos. A segunda consiste na elaboración do Informe de resultados, no que se valorará a presentación, xustificación metodolóxica e interpretación, así como a comparación con resultados bibliográficos.
Proba de resposta breve	Proba a través de Moodle pa dar resposta a preguntas tipo test, de resposta múltiple, de ordenación, de resposta breve, de discriminación, de completar e/ou de asociación.
Proba obxectiva	Resolución de 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 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.  Os alumnos con dispensa académica disporán de titorías 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 / Resultados	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:  -Conversa 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 de resposta breve	A1 A3 A4 A10 A14	Proba tipo test en Moodle para responder a preguntas diversas de resposta múltiple, breve, de discriminación, de asociación, etc, nun tempo determinado.	30
Proba obxectiva	A1 A3 A14 A20 B3	Proba escrita para resolver exercicios relacionados cos contidos das clases teóricas, seminarios e prácticas, e que terá lugar na convocatoria oficial do centro.	50

### Observacións avaliación

- A asistencia a totalidade das prácticas de laboratorio e a entrega do correspondente Informe son actividades obrigatorias pa todo o alumnado.-Para superar a asignatura será necesario obter unha nota non inferior a 5.0 sobre 10 en todas e cada unha das actividades avaliábeis.-A calificación de matrícula otorgarase preferentemente na primeira oportunidade.-Segunda oportunidade: repetición da proba mixta sobre contidos dos seminarios, prácticas e clases de teoría.-A calificación obtida nunha actividade superada manterase unicamente nas restantes convocatorias do curso académico (segunda oportunidade).-De non superar as dúas probas (test en Moodle + proba escrita), aínda que a nota media das actividades avaliábeis sexa superior a 5, a calificación numérica que figure na Acta será a media das dúas probas.
- O estudante obterá a calificación de Non Presentado cando non realice as prácticas e, polo tanto, tampouco se presente as dúas probas.
- Os estudantes que soliciten convocatoria adiantada de decembro rexiranse por esta mesma Guía docente.
- Todo o que ten relación ca "exención académica", "dedicación o estudo", "permanencia" e "fraude académico" rexirase pola correspondente normativa vixente da UDC.
- Do mesmo xeito, todo o relacionado coa perspectiva de género, adaptarase a práctica e a filosofía que se segue na UDC.

### 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>- P. W. Atkins, J. de Paula (2010). Physical Chemistry, 11th Ed. . Oxford University Press</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> </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 Electrochemistry.. 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