



Guía Docente				
Datos Identificativos				2024/25
Asignatura (*)	Química Física Avanzada		Código	610G01020
Titulación				
Descriptores				
Ciclo	Período	Curso	Tipo	Créditos
Grao	1º cuatrimestre	Cuarto	Obrigatoria	6
Idioma	CastelánInglés			
Modalidade docente	Presencial			
Prerrequisitos				
Departamento	Química			
Coordinación	Iglesias Martínez, Emilia	Correo electrónico	emilia.iglesias@udc.es	
Profesorado	Iglesias Martínez, Emilia Santaballa López, Juan Arturo	Correo electrónico	emilia.iglesias@udc.es arturo.santaballa@udc.es	
Web	campusvirtual.udc.es			
Descripción xeral	<p>PALABRAS CLAVE: interaccións iónicas e fenómenos de transporte molecular. Ecuación de velocidad e mecanismos de reacción. Teorías Cinetoquímicas. Catálise homoxénea. Introdución á cinética eletroquímica. Macromoléculas e coloides.</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 velocidad 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, proxeccar e realizar experimentos relacionados co transporte de materia e de carga.			A4    B3
· Proponer e elaborar un estudo cinético dunha reacción química.			A10    B4
· Aplicación de programas 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 velocidad.			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.			
Actitudinais:			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 actividad. Lei de Debye-Hückel. Forza iónica.</li><li>· As interaccións entre moléculas. Momento dipolar. Polarizabilidade: Clausius-Mossotti. Interaccións dipolares. Interacción hidrofóbica: autoagregation 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>· Ecuacions 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 velocidad e mecanismo de reacción	<ul style="list-style-type: none"><li>· Ecuación integrada de velocidad. 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 aplicacions	<ul style="list-style-type: none"><li>· Teoría de colisions: 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>· Reacciones en fase gas: mecanismo de Lindeman</li><li>· Reacciones en disolución. Reacciones controladas pola difusión dos reactivos.</li><li>· Reacciones fotoquímicas</li></ul>
Catálise	<ul style="list-style-type: none"><li>· Catálise homoxénea, heteroxénea e microheteroxénea</li><li>· Mecanismo xeral de catálise: ecuacions de velocidad</li><li>· Catálisis homoxénea: catálise nucleófila, catálise ácido-base</li><li>· Correlacions de enerxía libre: ecuacions de Bronsted, Hammet, Taft</li><li>· Catálise microheteroxénea: catálise micelar e enzimática.</li><li>· Catálise heteroxénea: isoterma de Langmuir. Ecuacions de velocidad</li></ul>
Introducción a cinética electroquímica	<ul style="list-style-type: none"><li>· Reacciones electroquímicas: aspectos singulares</li><li>· Interfase electrodo-disolución: modelo de Gouy-Chapman</li><li>· Velocidad 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 ecuacions de velocidad 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	
<b>Metodoloxías</b>	<b>Descripción</b>
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 resloveranse as dúbihdas plantexadas polo alumno.
Prácticas de laboratorio	Realizaranse experimentos relacionados cos conceptos abordados no curso. Consta de duas 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, comenzar co desenrolo do trabalho 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 respuesta 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 cuestiós conceptuais.

Atención personalizada	
<b>Metodoloxías</b>	<b>Descripción</b>
Seminario Prácticas de laboratorio	Recoméndase o uso das titorías individuais para a súa orientación na resolución das dúbihdas, cuestiós 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 calquier tipo de dúbihdas 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 trabalho 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 estudiante 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	Descripción	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 reflecta 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 quantitativo 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 obligatorias 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 availables.-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 actividad superada manterase únicamente nas restantes convocatorias do curso académico (segunda oportunidade).-De non superar as duas probas (test en Moodle + proba escrita), ainda que a nota media das actividades availables sexa superior a 5, a calificación numérica que figure na Acta será a media da das duas probas.
- O estudiante obterá a calificación de Non Presentado cando non realice as prácticas e, polo tanto, tampouco se presente as duas probas.
- Os estudiantes que soliciten convocatoria adiantada de decembro rexiranse por esta mesma Guía docente.
- Todo o que ten relación ca "exención académica", "dedicación oestudo", "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**

Bibliografía básica	<ul style="list-style-type: none"> <li>- P. W. Atkins, J. de Paula (2008). Química Física, 8<sup>a</sup> 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 2<sup>a</sup> 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>
Bibliografía complementaria	<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). Fisicoquímica 5<sup>a</sup> 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. 2<sup>a</sup> 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 Electrodics.. 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 nível 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 acordo coa normativa vixente que establece o proceso de elaboración de guías