



Guía Docente				
Datos Identificativos				2015/16
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	Presencial			
Prerrequisitos				
Departamento	Química Física e Enxeñaría Química 1			
Coordinación	Iglesias Martinez, Emilia	Correo electrónico	emilia.iglesias@udc.es	
Profesorado	Brandariz Lendoiro, Maria Isabel	Correo electrónico	i.brandariz@udc.es	
	Iglesias Martinez, Emilia		emilia.iglesias@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. 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. KEY WORDS: ionic interactions and molecular transport phenomena. Rate equation and reaction mechanisms. Chemical Kinetic Theories. Homogeneous catalysis. Introduction to electrochemical kinetics. Macromolecules and colloids. DESCRICIÓN: 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. DESCRIPCIÓN: 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. DESCRIPTION: Advanced Physical Chemistry addresses the phenomenological study of the interactions between ions and molecules, which allow us to understand the configuration of macromolecules of chemical and biological interest. Transport phenomena in solution makes possible the characterization of macromolecules and are central to the application of certain techniques to kinetic study of reactions. Chemical kinetics introduces the time variable in the study of a chemical reaction, analyzing the factors that modify reaction rate in order to determine the rate equation, and finally to propose a reaction mechanism at the molecular level to interpret the observed macroscopic reaction.			



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		
Metodolóxicas: · Ser capaz de planificar, proxectar e realizar experimentos relacionados co transporte de materia e de carga. · Ser capaz de 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 A19 A20 A22 A23 A27	B3	C3
Conceptual: · Coñecemento das 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 A4 A10 A14	B3	
Actitudinales: · Presentar informes axeitados dun estudo experimental · Analizar e criticar estudos cinéticos publicados de dificultade baixa.	A23 A25 A27	B1 B3 B4	C3 C6

Contidos

Temas	Subtemas
Interaccións iónicas e moleculares	· Interaccións entre ións en disolución: coeficiente de actividade. Lei de Debye-Hückel. Forza iónica. · As interaccións entre as moléculas. Momento dipolar. Polarizabilidade: Clausius-Mossotti. Interaccións dipolares. Interacción hidrofóbica: autoagregación e conformación molecular. · Colóides: micelas directa e inversa, 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, reaccións reversibles, reaccións consecutivas. · Aproximación do estado estacionario. · Mecanismos de reacción, reacción elemental. dedución de mecanismos de reaction.
Teorías cinetoquímicas e aplicaciónes	· 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 de transferencia electrónica · 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 · Catálise microheteroxénea: catálise micelar; catálise enzimática. Inhibición
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	A25 A27 B3	21	42	63
Seminario	A27 B1 C6	7	14	21
Prácticas de laboratorio	A19 A20 A22 A23 A27 B1 B4 C3	20	40	60
Proba mixta	A1 A3 A4 A10 A14 A20	4	0	4
Atención personalizada		2	0	2
*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. A través do campus virtual, o alumno disporá con antelación o material que complementa a clase, para exame previo e análise. A lectura previa dos temas discutidos na clase, sen dúbida, leva a unha mellor utilización e facilita a interacción alumno-profesor.
Seminario	? Seminarios: aclaración e consolidación do contido teórico por medio da resolución de cuestións, problemas ou crítica de estudos prácticos. O desenvolvemento dos seminarios baséase no traballo e participación activa dos alumnos, por elo, a relación de exercicios, preguntas e / ou casos que han traballar en cada sesión de seminario estará dispoñible con antelación. O alumno será quen explique e expoña a resolución dos problemas.
Prácticas de laboratorio	? Faranse experimentos relacionados cos conceptos abordados no curso . O alumno, coa axuda do profesor, tentará de reproducir experimentos de laboratorio sinxelos. Cada alumno elaborará un informe sobre cada práctica, segundo a orientación do profesor, xunto coa exposición /discusión en seminario dos resultados obtidos. Será necesario superar as prácticas laboratorio para aprobar a asignatura.
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
Prácticas de laboratorio	Antes de realizar o traballo experimental, o alumno fará, coa axuda do profesor, a interpretación do artigo científico que resume a experiencia que vai reproducir. Durante o desenvolvemento do experimento será asesorado nas complicacións que poidan xurdir. Finalizada a mesma, o profesor guiará o alumno na interpretación dos resultados en base os modelos cuantitativos desenvolvidos na clase e na sala de informática para o tratamento cuantitativo dos resultados. 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.

Avaliación			
Metodoloxías	Competencias	Descrición	Cualificación
Sesión maxistral	A25 A27 B3	? A participación do alumno durante o desenvolvemento desta actividade, facendo preguntas que axudan a aclarar conceptos ou plantexando enfoques alternativos é incentivada. Outras veces será o profesor quen plantexe cuestións relacionadas ca materia.	0
Seminario	A27 B1 C6	? As sesións de seminario basearanse no traballo do alumno, que encontrará nesta actividade o marco axeitado para expoñer o súa maneira de entender a asignatura. Fortalecen e establecen os conceptos teóricos desenvolvidos nas distintas disciplinas. Serven para o debate sobre as metodoloxías e procedementos aplicados en cada caso. ? A avaliación desta actividade será baseada no traballo persoal nas sesións de seminario.	20



Prácticas de laboratorio	A19 A20 A22 A23 A27 B1 B4 C3	? Reflicten a destreza e capacidade do alumno na planificación, deseño e desenvolvemento de experimentos sinxelos. ? Ensaio de distintas técnicas para caracterizar os diferentes sistemas ou procesos no seguimento dunha reacción química. ? Tratamento cuantitativo dos resultados experimentais según os modelos introducidos e explicación dos mesmos en base a modelos teóricos. ? A entrega dun informe de laboratorio que reflicta os conceptos anteriores é necesaria. ? Na avaliación desta actividade é tido en conta o traballo de laboratorio, os resultados obtidos eo informe preparado.	25
Proba mixta	A1 A3 A4 A10 A14 A20	? A realización da proba escrita consta de cuestións teóricas e prácticas derivadas dos contidos teóricos do curso, dos seminarios e das prácticas. ? Para aprobar a asignatura é necesario superar cada unha das partes. A puntuación obtida dunha actividade superada, manterase nas seguintes convocatorias do curso. ? En caso de non aprobar a asignatura, a calificación que figura na Acta, será a media das actividades non-superadas. ? A clasificación máxima posible non depende da convocatoria en que se supere a asignatura. ? O alumno obterá a cualificación de Non Presentado cando non se presentase exame oficial (Programación da Facultade)	55

Observacións avaliación

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). Modern Electrochemistry 1. Ionics. 2nd ed.. Plenum Press, New York
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 1/610G01007
 Química 2/610G01008
 Química 3/610G01009
 Química 4/610G01010
 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. -Se recomenda conocer ingles con 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