



Guía Docente				
Datos Identificativos			2016/17	
Asignatura (*)	Química Física Avanzada		Código	610G01020
Titulación	Grao en Química			
Descriptor				
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. DESCRIPCIÓN: 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
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 reacción.
Teorías cinetoquímicas e aplicacións	· Teoría de colisións: factor de frecuencias · Teoría do complexo activado: aproximación según a Termodinámica Estadística e según a 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	A25 A27 B1 B3 C6	7	14	21
Prácticas de laboratorio	A19 A20 A22 A23 A25 A27 B1 B3 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 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.

Avaliación			
Metodoloxías	Competencias	Descrición	Cualificación
Seminario	A25 A27 B1 B3 C6	? As sesións de seminario basearanse no traballo do alumno, que encontrará nesta actividade o marco axeitado para expoñer a 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.	10
Prácticas de laboratorio	A19 A20 A22 A23 A25 A27 B1 B3 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.	20
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 as prácticas e a proba mixta. 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. ? O alumno obterá a cualificación de Non Presentado cando non se presentase exame oficial (Programación da Facultade)	70

Observacións avaliación

- A asistencia a totalidade das prácticas de laboratorio e a entrega do correspondente Informe son obrigatorios.
- A asistencia os seminarios e obligatoria pos alumnos de primeira matrícula na asignatura a tempo completo.
- A calificación de matrícula otorgarase preferentemente na primeira oportunidade.
- Otorgarase a calificación de "Non presentado" cando se participou en actividades que sumen menos do 50% da calificación final.
- Segunda oportunidade: repetición da proba mixta sobre contidos dos seminarios, prácticas e clases de teoría.

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