



Guía docente				
Datos Identificativos				2017/18
Asignatura (*)	Química Física Avanzada		Código	610G01020
Titulación	Grao en Química			
Descriptor				
Ciclo	Periodo	Curso	Tipo	Créditos
Grado	1º cuatrimestre	Cuarto	Obligatoria	6
Idioma	CastellanoInglés			
Modalidad docente	Presencial			
Prerrequisitos				
Departamento	Química			
Coordinador/a	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			
Descripción general	DESCRIPTOR: 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. 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.			

Competencias del título	
Código	Competencias del título
A1	Utilizar la terminología química, nomenclatura, convenios y unidades.
A3	Conocer las características de los diferentes estados de la materia y las teorías empleadas para describirlos.
A4	Conocer los tipos principales de reacción química y sus principales características asociadas.
A10	Conocer la cinética del cambio químico, incluyendo la catálisis y los mecanismos de reacción.
A14	Demostrar el conocimiento y comprensión de conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química.
A19	Llevar a cabo procedimientos estándares y manejar la instrumentación científica.
A20	Interpretar los datos procedentes de observaciones y medidas en el laboratorio.
A22	Planificar, diseñar y desarrollar proyectos y experimentos.
A23	Desarrollar una actitud crítica de perfeccionamiento en la labor experimental.
A25	Relacionar la Química con otras disciplinas y reconocer y valorar los procesos químicos en la vida diaria.
A27	Impartir docencia en química y materias afines en los distintos niveles educativos.
B1	Aprender a aprender.
B3	Aplicar un pensamiento crítico, lógico y creativo.
B4	Trabajar de forma autónoma con iniciativa.
C3	Utilizar las herramientas básicas de las tecnologías de la información y las comunicaciones (TIC) necesarias para el ejercicio de su profesión y para el aprendizaje a lo largo de su vida.
C6	Valorar críticamente el conocimiento, la tecnología y la información disponible para resolver los problemas con los que deben enfrentarse.

Resultados de aprendizaje	
Resultados de aprendizaje	Competencias del título

Metodológicas: · Ser capaces de planificar, diseñar, y realizar experimentos relacionados con el transporte de materia y transporte de carga. · Ser capaces de plantear y diseñar el estudio cinético de una reacción química. · Aplicación de programas informáticos sencillos al análisis cuantitativo de datos cinéticos. · Interpretación de los resultados en base a un mecanismo de reacción. · Simulación / predicción de datos inéditos a partir de la ecuación de velocidad	A3 A19 A20 A23 A27	B3	C3
Conceptual: · Conocimiento de las interacciones intermoleculares e inter- o intramoleculares y su relación con los fenómenos de asociación, auto-agregación o conformación molecular. · Manejar los métodos propios de la cinética química. Interpretación a nivel molecular (mecanicista) de las reacciones químicas. Entender y conocer los factores que pueden modificar la velocidad de las reacciones químicas. · Comprender el proceso de catálisis y su relación con la activación química, fotoquímica y electroquímica.	A1 A4 A10 A14	B3	
Actitudinales: · Presentar informes adecuados de un estudio cinético experimental · Analizar y criticar estudios cinéticos publicados de dificultad baja. · Planificar y desarrollar experimentos sencillos	A22 A23 A25 A27	B1 B3 B4	C3 C6

Contenidos	
Tema	Subtema
Interacciones iónicas y moleculares	· Interacciones entre iones en disolución: coeficiente de actividad. Lei de Debye-Hückel. Fuerza iónica. · Interacciones intermoleculares. Momento dipolar. Polarizabilidad: Clausius-Mossotti. Interacciones dipolares. Interacción hidrofóbica: autoagregación y conformación molecular. · Coloides: micelas directa e inversas, membranas biológicas. · Macromoléculas
Fenómenos de transporte	· Ecuaciones fenomenológicas. Flujo. Difusión. Ley de Fick. Ecuación de Stokes-Einstein. · Conductividad térmica · Conductividad eléctrica: Teoría de Debye-Huckel-Onsager. · Viscosidad
Ecuación de velocidad y Mecanismos de reacción	· Ecuaciones integradas de velocidad. Método de velocidades iniciales. Orden de reacción y constante de velocidad. Reacción estequiométrica. Método de aislamiento. Relación entre concentración y propiedad física. Técnicas experimentales · Esquemas de reacción complejos: reacciones paralelas, reversibles y consecutivas. · Aproximación del estado estacionario. · Mecanismos de reacción: reacción elemental. Deducción de mecanismos de reacción
Teorías cinetoquímicas y aplicaciones	· Teoría de colisiones: factor de frecuencias · Teoría del complejo activado: aproximación según la Termodinámica Estadística y según la Termodinámica clásica. Curvas de energía potencial · Reacciones en fase gas: mecanismo de Lindeman · Reacciones en disolución. Reacciones con control por difusión. · Reacciones fotoquímicas



Catálisis	· Catálisis homogénea, heterogénea y microheterogénea · Mecanismo general de catálisis: ecuaciones de velocidad · Catálisis homogénea: catálisis nucleófila, catálisis ácido-base · Correlaciones de energía libre: ecuación de Swain-Scott, ley de Bronsted, correlaciones de Hammett, correlaciones de Taft · Catálisis microheterogénea: catálisis micelar; catálisis enzimática.
Introducción a la cinética electroquímica	· Reacciones electroquímicas: aspectos singulares · Interfase electrodo-disolución: modelo de Gouy-Chapman · Velocidad de transferencia de carga. Ecuación de Butler-Volmer · Voltametría
Prácticas	· Experimentos de Laboratorio relacionados con fenómenos de transporte, determinación de ecuaciones de velocidad e procesos de catálisis.

Planificación				
Metodologías / pruebas	Competencias	Horas presenciales	Horas no presenciales / trabajo autónomo	Horas totales
Sesión magistral	A25 A27 B3	21	42	63
Seminario	A25 A27 B3 B1 C6	7	28	35
Prácticas de laboratorio	A19 A20 A22 A23 A25 A27 B1 B3 B4 C3	20	20	40
Presentación oral	A20 A27 B3 C6 C3	1	5	6
Prueba mixta	A1 A3 A4 A10 A14 A20	4	0	4
Atención personalizada		2	0	2
(*) Los datos que aparecen en la tabla de planificación són de carácter orientativo, considerando la heterogeneidad de los alumnos				

Metodologías	
Metodologías	Descripción
Sesión magistral	? En las clases de exposición se introducirán los conceptos, modelos, métodos y teorías de los contenidos fundamentales del programa de la asignatura. A través del campus virtual, el alumno dispondrá del material que complementa la clase. La lectura previa de los temas discutidos en clase, sin duda, redundará en un mejor rendimiento y facilita la interacción alumno-profesor.
Seminario	? Esta actividad se llevará a cabo en grupo reducido. El desarrollo de los seminarios se basa en el trabajo personal y en la participación activa del alumno. Aclaran y consolidan los contenidos teóricos mediante la resolución de cuestiones, problemas y la crítica de estudios prácticos. La relación de ejercicios, preguntas y/o casos que se van a trabajar en cada sesión de seminario estará disponible en el Aula virtual con antelación.
Prácticas de laboratorio	? Se realizarán experimentos relacionados con los conceptos abordados durante el curso. El alumno, con ayuda del profesor, intentará reproducir experimentos de laboratorio sencillos. Cada alumno elaborará un informe o una exposición sobre el trabajo de laboratorio, siguiendo las orientaciones del profesor. Será necesario realizar las prácticas de laboratorio para aprobar la asignatura.
Presentación oral	? Presentación de los resultados obtenidos en las prácticas de laboratorio utilizando las tecnologías de la información y comunicación. Debate y crítica de los mismos en grupo.
Prueba mixta	? Resolución de cuestiones de teoría y ejercicios relacionados con los temas abordados en las clases expositivas, en las prácticas de laboratorio y en los seminarios. El alumno debe demostrar de forma independiente y en un período de tiempo predefinido, los conocimientos adquiridos y la capacidad de resolver ejercicios y/o cuestiones conceptuales, así como la crítica de sus resultados.

Atención personalizada



Metodologías	Descrición
Sesión magistral Seminario Prácticas de laboratorio Presentación oral	Se recomenda el uso de tutorías individuais en la resolución de las cuestións e conceptos que non quedaron suficientemente claros, tanto en lo que respecta al desenvolvemento de la teórica como de los seminarios, prácticas de laboratorio o en la preparación de la proba final. Los profesores estarán disponibles para resolver calquera pregunta sobre los contenidos de la asignatura en el horario establecido. Los estudantes a tempo parcial o con dispensa para la asistencia académica dispondrán de tutorías tanto presenciales como por correo electrónico, sempre que sea necesario. Antes de realizar el traballo experimental, el estudante fará un resúmen del artigo científico que recolle la experiencia que va a reproducir. Durante el desenvolvemento del experimento se asesora al alumno en las complicacións que puedan surgir. Despoés de la mesma, el profesor guiará al estudante en la interpretación de los resultados, basándose en los modelos teóricos desenvolvidos en el aula para el tratamento cuantitativo de los resultados.

Evaluación			
Metodologías	Competencias	Descrición	Calificación
Seminario	A25 A27 B3 B1 C6	? Las sesións de seminario se han de basar en el traballo do alumno, que encontrará en esta actividade el marco adecuado para expor su maneira de entender la asignatura. Refuerzan y asientan los conceptos teóricos desenvolvidos en los diferentes temas mediante el planteamiento y resolución de exercicios e cuestións. Sirven de discusión de las metodoloxías y procedimientoss aplicados en cada caso.	5
Prácticas de laboratorio	A19 A20 A22 A23 A25 A27 B1 B3 B4 C3	? Reflejan la destreza e capacidade do alumno en la planificación, deseño e desenvolvemento de experimentos sencillos. ? Ensayo de diferentes técnicas en la caracterización de sistemas o en el seguimientoss de procesos de reacción. ? Tratamiento cuantitativo de los resultados experimentales e explicación de los mismos en base a modelos teóricos. ? Se requiere la presentación de un informe de laboratorio que refleje los conceptos anteriores. ? En la evaluación de esta actividade se tiene en cuenta el traballo de laboratorio, los resultados obtenidos e el Informe elaborado.	5
Prueba mixta	A1 A3 A4 A10 A14 A20	? Prueba escrita para responder a cuestións teóricas e exercicios relacionados con los contenidos de las sesións magistrales, los seminarios e las prácticas. ? Se requiere realizar las prácticas e aprobar la prueba escrita para superar la asignatura. La calificación obtenida en una actividade superada se mantendrá únicamente en las restantes convocatorias del curso académico. ? De no superar la asignatura, la calificación que figure en el Acta será la correspondiente a la media de las actividades no superadas. ? El alumn@ obtendrá la calificación de No Presentado cuando no realice las prácticas e, por tanto, tampoco se presenta a la prueba mixta.	80
Presentación oral	A20 A27 B3 C6 C3	? Exposición e análisis crítico de los resultados de las prácticas de laboratorio. ? Calidad de la información elaborada en la presentación e de las habilidades mostradas en la comunicación. ? Capacidad para defender e contrastar sus resultados	10

Observacións evaluación



- La asistencia a la totalidad de las prácticas de laboratorio y la entrega del correspondiente Informe son obligatorios.
- La asistencia a seminarios es obligatoria para los alumnos de primera matrícula en la asignatura a tiempo completo.
- La calificación de matrícula se otorga preferentemente en la primera oportunidad. -Segunda oportunidad: repetición de la prueba mixta sobre contenidos de los seminarios, prácticas y clases de teoría.

Fuentes de información

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
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

Recomendaciones

Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente

Química General 1/610G01007
Química General 2/610G01008
Química General 3/610G01009
Laboratorio de Química 1/610G01010
Química Física 1/610G01016
Química Física 2/610G01017
Química Física 3/610G01018
Experimentación en Química Física/610G01019

Asignaturas que se recomienda cursar simultáneamente

Asignaturas que continúan el temario

Otros comentarios

- Son necesarios los conocimientos de las asignaturas de Química y de Química Física
- Saber redactar, sintetizar y presentar ordenadamente un trabajo.
- Dominar la representación gráfica, regresión lineal con conocimientos básicos de estadística.
- Utilizar a nivel de usuario herramientas básicas de informática: Excel, Word, Power Point.
- Se recomienda conocer ingles con nivel medio de comprensión de lectura.



(*) La Guía Docente es el documento donde se visualiza la propuesta académica de la UDC. Este documento es público y no se puede modificar, salvo cosas excepcionales bajo la revisión del órgano competente de acuerdo a la normativa vigente que establece el proceso de elaboración de guías