



| Guía docente          |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |                    |                        |           |
|-----------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------|------------------------|-----------|
| Datos Identificativos |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |                    |                        | 2018/19   |
| Asignatura (*)        | Química Física Avanzada                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |                    | Código                 | 610G01020 |
| Titulación            | Grao en Química                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |                    |                        |           |
| Descriptores          |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |                    |                        |           |
| 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   | 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.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |                    |                        |           |
|                       | 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:                                                                                                                                                                                                                 | A3  | B1 | C3 |
| · Ser capaces de planificar, diseñar, y realizar experimentos relacionados con el transporte de materia y transporte de carga.                                                                                                 | A4  | B3 |    |
| · Ser capaces de plantear y diseñar el estudio cinético de una reacción química.                                                                                                                                               | A10 | B4 |    |
| · Aplicación de programas informáticos sencillos al análisis cuantitativo de datos cinéticos.                                                                                                                                  | A19 |    |    |
| · Interpretación de los resultados en base a un mecanismo de reacción.                                                                                                                                                         | A20 |    |    |
| · Simulación / predicción de datos inéditos a partir de la ecuación de velocidad                                                                                                                                               | A22 |    |    |
|                                                                                                                                                                                                                                | A23 |    |    |
|                                                                                                                                                                                                                                | A27 |    |    |
| Conceptual:                                                                                                                                                                                                                    | A1  | B3 |    |
| · Conocimiento de las interacciones intermoleculares e inter- o intramoleculares y su relación con los fenómenos de asociación, auto-agregación o conformación molecular.                                                      | A4  |    |    |
| · 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. | A10 |    |    |
| · Comprender el proceso de catálisis y su relación con la activación química, fotoquímica y electroquímica.                                                                                                                    | A14 |    |    |
| Actitudinales:                                                                                                                                                                                                                 | A22 | B1 | C3 |
| · Presentar informes adecuados de un estudio cinético experimental                                                                                                                                                             | A23 | B3 | C6 |
| · Analizar y criticar estudios cinéticos publicados de dificultad baja.                                                                                                                                                        | A25 | B4 |    |
| · Planificar y desarrollar experimentos sencillos                                                                                                                                                                              | A27 |    |    |

| Contenidos                                     |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |
|------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Tema                                           | Subtema                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |
| Interacciones iónicas y moleculares            | <ul style="list-style-type: none"> <li>· Interacciones entre iones en disolución: coeficiente de actividad. Lei de Debye-Hückel. Fuerza iónica.</li> <li>· Interacciones intermoleculares. Momento dipolar. Polarizabilidad: Clausius-Mossotti. Interacciones dipolares. Interacción hidrofóbica: autoagregación y conformación molecular.</li> <li>· Coloides: micelas directa e inversas, membranas biológicas.</li> <li>· Macromoléculas</li> </ul>                                                                                  |
| Fenómenos de transporte                        | <ul style="list-style-type: none"> <li>· Ecuaciones fenomenológicas. Flujo. Difusión. Ley de Fick. Ecuación de Stokes-Einstein.</li> <li>· Conductividad térmica</li> <li>· Conductividad eléctrica: Teoría de Debye-Huckel-Onsager.</li> <li>· Viscosidad</li> </ul>                                                                                                                                                                                                                                                                   |
| Ecuación de velocidad y Mecanismos de reacción | <ul style="list-style-type: none"> <li>· 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</li> <li>· Esquemas de reacción complejos: reacciones paralelas, reversibles y consecutivas.</li> <li>· Aproximación del estado estacionario.</li> <li>· Mecanismos de reacción: reacción elemental. Deducción de mecanismos de reacción</li> </ul> |
| Teorías cinetoquímicas y aplicaciones          | <ul style="list-style-type: none"> <li>· Teoría de colisiones: factor de frecuencias</li> <li>· Teoría del complejo activado: aproximación según la Termodinámica Estadística y según la Termodinámica clásica. Curvas de energía potencial</li> <li>· Reacciones en fase gas: mecanismo de Lindeman</li> <li>· Reacciones en disolución. Reacciones con control por difusión.</li> <li>· Reacciones fotoquímicas</li> </ul>                                                                                                            |



|                                           |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            |
|-------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Catálisis                                 | <ul style="list-style-type: none"> <li>· Catálisis homogénea, heterogénea y microheterogénea</li> <li>· Mecanismo general de catálisis: ecuaciones de velocidad</li> <li>· Catálisis homogénea: catálisis nucleófila, catálisis ácido-base</li> <li>· Correlaciones de energía libre: ecuación de Swain-Scott, ley de Bronsted, correlaciones de Hammett, correlaciones de Taft</li> <li>· Catálisis microheterogénea: catálisis micelar; catálisis enzimática.</li> </ul> |
| Introducción a la 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                                 | · Experimentos de Laboratorio relacionados con fenómenos de transporte, determinación de ecuaciones de velocidad y 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                                                                                                                          | A1 A4 A10 A14 A20<br>B1 B3             | 7                  | 28                                       | 35            |
| Prácticas de laboratorio                                                                                                           | A19 A20 A22 A23<br>A25 A27 B1 B3 B4 C3 | 20                 | 20                                       | 40            |
| Presentación oral                                                                                                                  | A20 A27 B3 C3 C6                       | 1                  | 5                                        | 6             |
| Prueba mixta                                                                                                                       | A1 A3 A4 A10 A14<br>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. 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 oral 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. (Opción alternativa a la presentación de Informe escrito)                                                                                                                                                                |
| 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 |
|------------------------|



| Metodoloxías                                                                   | Descrición                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        |
|--------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Sesión magistral<br>Seminario<br>Prácticas de laboratorio<br>Presentación oral | <p>Se recomenda o uso de tutorías individuais en a resolución das cuestións e conceptos que non quedaron suficientemente claros, tanto en lo que respecta ao desenvolvemento da teórica como de los seminarios, prácticas de laboratorio o en a preparación da proba final. Los profesores estarán disponibles para resolver cualquier pregunta sobre los contenidos de la asignatura en el horario establecido.</p> <p>Los estudiantes a tempo parcial o con dispensa para la asistencia académica dispondrán de tutorías tanto presenciales como por correo electrónico, siempre que sea necesario.</p> <p>Antes de realizar el trabajo experimental, el estudiante hará un resumen del artículo científico que recoge la experiencia que va a reproducir. Durante el desarrollo del experimento se asesora al alumno en las complicaciones que puedan surgir. Después de la misma, el profesor guiará al estudiante en la interpretación de los resultados, basándose en los modelos teóricos desarrollados en el aula para el tratamiento cuantitativo de los resultados.</p> |

| Evaluación               |                                        |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      |              |
|--------------------------|----------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------|
| Metodoloxías             | Competencias                           | Descrición                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           | Calificación |
| Prácticas de laboratorio | A19 A20 A22 A23<br>A25 A27 B1 B3 B4 C3 | <p>? Reflejan la destreza y capacidad del alumno en la planificación, diseño y desarrollo de experimentos sencillos.</p> <p>? Ensayo de diferentes técnicas en la caracterización de sistemas o en el seguimiento de procesos de reacción.</p> <p>? Informe de laboratorio que refleje el tratamiento cuantitativo de los resultados experimentales y su explicación en base a modelos teóricos.</p> <p>? En la evaluación de esta actividad se tiene en cuenta el trabajo de laboratorio, los resultados obtenidos y el Informe elaborado (escrito o como presentación oral).</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   | 10           |
| Prueba mixta             | A1 A3 A4 A10 A14<br>A20                | <p>? Prueba escrita para responder a cuestiones teóricas y ejercicios relacionados con los contenidos de las sesiones magistrales, los seminarios y las prácticas.</p> <p>? Se requiere realizar las prácticas y aprobar la prueba escrita para superar la asignatura. La calificación obtenida en una actividad superada se mantendrá únicamente en las restantes convocatorias del curso académico (segunda oportunidad).</p> <p>? De no superar las prácticas y el examen final, aunque la media sea superior a 5, la calificación que figure en el Acta será "suspenso".</p> <p>? El alumno obtendrá la calificación de No Presentado cuando no realice las prácticas y, por tanto, tampoco se presente a la prueba mixta.</p> <p>? El proceso de enseñanza-aprendizaje se refiere a un curso académico, por lo que, en los sucesivos cursos académicos el alumno vuelve a comenzar de cero.</p> | 80           |
| Presentación oral        | A20 A27 B3 C3 C6                       | <p>? Exposición y análisis crítico de los resultados de las prácticas de laboratorio.</p> <p>? Calidad de la información elaborada en la presentación y de las habilidades mostradas en la comunicación.</p> <p>? Capacidad para defender y contrastar sus resultados</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            | 10           |

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

| Fuentes de información |
|------------------------|
|------------------------|



|                       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |
|-----------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>Básica</b>         | <ul style="list-style-type: none"><li>- P. W. Atkins, J. de Paula (2008). Química Física, 8ª Ed. . Panamericana</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). Modern Electrochemistry 1. Ionics. 2nd ed.. Plenum Press, New York</li></ul>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |
| <b>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 Electrodics.. Kluwer Academic/Plenum Press: New York</li></ul> |

## 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