



Guía docente				
Datos Identificativos				2020/21
Asignatura (*)	Química Física Avanzada		Código	610G01020
Titulación	Grao en Química			
Descriptorios				
Ciclo	Periodo	Curso	Tipo	Créditos
Grado	1º cuatrimestre	Cuarto	Obligatoria	6
Idioma	CastellanoInglés			
Modalidad docente	Híbrida			
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	DESCRIPTORIOS: 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. La 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.			
Plan de contingencia	1. Modificaciones en los contenidos -No se realizarán cambios 2. Metodologías *Metodologías docentes que se mantienen: -Clases magistrales -Seminarios -Prácticas (sólo las partes de comprensión del guión y del informe con resultados simulados) -Atención personalizada. *Metodologías docentes que se modifican: -Desarrollo de experimentos en el laboratorio 3. Mecanismos de atención personalizada al alumnado: -Correo electrónico -Foros de Moodle -Teams 4. Modificacines en la evaluación: -La parte de desarrollo en el Lab, se suma a las otros dos actividades *Observaciones de evaluación: 5. Modificaciones de la bibliografía o webgrafía: -No hay cambios			



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 A4 A10 A19 A20 A22 A23 A27	B1 B3 B4	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. Polarizabilidade: Clausius-Mossotti. Interacciones dipolares. Interacción hidrofóbica: autoagregation 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, ecuación de Bronsted, ecuación de Hammett, ecuación de Taft · Catálisis microheterogénea: catálisis micelar; catálisis enzimática. · Catálisis heterogénea: isoterma de Langmuir. Leyes de velocidad.
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 y procesos de catálisis.

Planificación				
Metodologías / pruebas	Competencias	Horas presenciales	Horas no presenciales / trabajo autónomo	Horas totales
Sesión magistral	A4 A10 A25 A27 B3	21	50	71
Glosario	A1 A14 B1	0	5	5
Seminario	A1 A4 A10 A14 B3 B1	7	21	28
Prueba de ensayo/desarrollo	A14 B3 C6	0	2	2



Prácticas de laboratorio	A19 A20 A22 A23 A25 A27 B1 B3 B4 C3	20	20	40
Prueba mixta	A1 A3 A4 A10 A14 A20	4	0	4
Atención personalizada		0	0	0

(*) 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.
Glosario	Elaboración de una lista de conceptos clave (términos, autores, ecuaciones típicas, ...), con su explicación, que van surgiendo en cada tema. Es una actividad de Moodle en la que se limita el número de conceptos por alumno, buscando la máxima participación.
Seminario	Esta actividad se llevará a cabo en grupo reducido. Se incidirá en determinados conceptos, mediante el desarrollo detallado de ejercicios estándar y se resolverán dudas planteadas por el alumno.
Prueba de ensayo/ desarrollo	De forma periódica al finalizar cada unidad temática, incluyendo el seminario/s correspondiente/s, se propondrá una prueba/ensayo durante las clases de seminario, para que el alumno pueda demostrar el aprovechamiento y participación en estas sesiones. Se contempla que se realice a través de Moodle en fechas concretas y en un tiempo determinado. Se persigue con ello, no sólo realizar un seguimiento de la evolución del alumnado, sino además propiciar el sistema de evaluación continua.
Prácticas de laboratorio	Se realizan experimentos relacionados con los conceptos abordados en el curso. Consta de tres fases: La primera requiere completar un cuestionario a través de Moodle relativo al experimento/s que le corresponde desarrollar en el Laboratorio. La segunda incluye el trabajo del alumno en el Laboratorio: planificación del experimento, desarrollo del mismo y análisis de resultados. La tercera consiste en la elaboración del Informe de resultados, en el que se valorará la presentación, justificación metodológica e interpretación, así como la contrastación con resultados bibliográficos.
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	Descripción
Glosario Seminario Prácticas de laboratorio	Se recomienda el uso de tutorías individuales en la resolución de las cuestiones y conceptos que no quedaron suficientemente claros, tanto en lo que respecta al desarrollo de la teoría como de los seminarios, prácticas de laboratorio o en la preparación de la prueba final. Los profesores estarán disponibles para resolver cualquier pregunta sobre los contenidos de la asignatura en el horario establecido. Los estudiantes con dispensa académica dispondrán de tutorías tanto presenciales como por correo electrónico o Teams, siempre que sea necesario. 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.

Evaluación



Metodologías	Competencias	Descripción	Calificación
Glosario	A1 A14 B1	Elaboración de un glosario de términos/conceptos, ..., que van surgiendo en cada tema. Para obtener la máxima puntuación cada alumno debe proponer un máximo de diez términos que cubran todos los temas de los contenidos.	10
Prácticas de laboratorio	A19 A20 A22 A23 A25 A27 B1 B3 B4 C3	En la evaluación de esta actividad se tiene en cuenta el cuestionario de Moodle, el trabajo de laboratorio y el Informe de resultados (escrito o como presentación oral): -Cuestionario en Moodle previo al desarrollo del experimento en el Laboratorio que refleje la comprensión del/los experimento/s. -Desarrollo del experimento en el Laboratorio: planificación, toma de datos y análisis. -Informe de resultados que se evaluará en cuanto a la presentación, el tratamiento cuantitativo y la explicación de los resultados en base a modelos teóricos.	15
Prueba mixta	A1 A3 A4 A10 A14 A20	Prueba escrita para responder a cuestiones teóricas y ejercicios relacionados con los contenidos de las sesiones magistrales, los seminarios y las prácticas. Se requiere realizar las prácticas y aprobar la prueba mixta y de ensayo para superar la asignatura. La calificación obtenida en una actividad superada se mantendrá únicamente en las restantes convocatorias del curso académico (segunda oportunidad). De no superar la prueba mixta y de ensayo, aunque la nota media de las actividades sea superior a 5, la calificación numérica que figure en el Acta será la media de las puntuaciones obtenida en las pruebas mixta y de ensayo. El alumn@ obtendrá la calificación de No Presentado cuando no realice las prácticas y, por tanto, tampoco se presente a las pruebas	50
Prueba de ensayo/desarrollo	A14 B3 C6	A lo largo del curso se harán cuatro/cinco pruebas cortas de duración inferior a 30 min, cada una relativa a las unidades temáticas de los contenidos. Se preferirá el desarrollo a través de Moodle siempre que sea posible.	25

Observaciones evaluación

- La asistencia a la totalidad de las prácticas de laboratorio y la entrega del correspondiente Informe son obligatorios.
- La asistencia a seminarios no es obligatoria para el alumno con dispensa académica. De no ser posible su participación en la prueba de ensayo, la calificación se sumará a la prueba mixta.
- Para superar la asignatura será necesario obtener una nota no inferior a 5.0 sobre 10 en todas las actividades evaluables.
- 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. Para aquéllos alumnos que no hayan obtenido un 5.0 sobre 10 en la prueba de ensayo, la calificación de ésta se sumará a la prueba mixta.

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 inglés 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