



Guía Docente				
Datos Identificativos			2020/21	
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	Híbrida			
Prerrequisitos				
Departamento	Química			
Coordinación	Iglesias Martinez, Emilia	Correo electrónico	emilia.iglesias@udc.es	
Profesorado	Brandariz Lendoiro, María 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. 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.			
Plan de continxencia	1. Modificacións nos contidos -Non se realizarán cambios 2. Metodoloxías *Metodoloxías docentes que se manteñen: -Sesión maxistral -Seminarios -Prácticas (parte de comprensión do guión e informe de resultados simulados) -Atención persoal *Metodoloxías docentes que se modifican -Practicas no laboratorio 3. Mecanismos de atención personalizada ao alumnado -Correo electrónico -Foros de Moodle -Teams 4. Modificacións na avaliación: -A nota da parte de prácticas do desenrolo do experimento suprimido, súmase as outras dúas *Observacións de avaliación: 5. Modificacións da bibliografía ou webgrafía -Non hay modificacións			

Competencias do título	
Código	Competencias do título
A1	Utilizar a terminoloxía química, nomenclatura, convenios e unidades.
A3	Cñecer 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:		A3	B1
· Planificar, proxectar e realizar experimentos relacionados co transporte de materia e de carga.		A4	B3
· Ppropoñer e elaborar un estudo cinético dunha reacción química.		A10	B4
· Aplicación de programas informáticos sinxelos para o análise cuantitativo dos datos cinéticos.		A19	
· Interpretación dos resultados en base a un mecanismo de reacción.		A20	
· Simulación / predicción de datos non publicados partindo da ecuación de velocidade.		A22	
		A23	
		A27	
Conceptual:		A1	B3
· Comprender as interaccións interiónicas e inter- ou intramoleculares e a súa relación cos fenómenos de asociación, auto-agregación ou conformación molecular.		A4	
· Manexar os métodos propios da cinética química. Interpretación a nivel molecular (mecanicista) das reaccións químicas.		A10	
Entender e coñecer os factores que poden modificar a velocidade dunha reacción.		A14	
· Comprender o proceso de catálise e súa relación coa activación química, fotoquímica ou electroquímica.			
Actitudinais:		A22	B1
· Presentar informes axeitados dun estudo experimental		A23	B3
· Analizar e criticar estudos cinéticos publicados de dificultade baixa.		A25	B4
		A27	

Contidos	
Temas	Subtemas
Interaccións iónicas e moleculares	· Interaccións entre ións en disolución: coeficiente de actividade. Lei de Debye-Hückel. Forza iónica. · As interaccións entre 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, reversibles e consecutivas. · Aproximación do estado estacionario. · Mecanismos de reacción, reacción elemental. deducción de mecanismos de reaction.
Teorías cinetoquímicas e aplicacións	· Teoría de colisións: factor de frecuencias · Teoría do complexo activado: aproximación según a Termodinámica Estadística e según la Termodinámica clásica. Curvas de enerxía potencial · Reaccións en fase gas: mecanismo de Lindeman · Reaccións en disolución. Reaccións controladas pola difusión dos reactivos. · Reaccións 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: ecuacións de Bronsted, Hammet, Taft · Catálise microheteroxénea: catálise micelar e enzimática. · Catálise heteroxénea: isoterma de Langmuir. Ecuacións de velocidade
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	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
Proba de ensaio	A14 B3 C6	0	2	2
Prácticas de laboratorio	A19 A20 A22 A23 A25 A27 B1 B3 B4 C3	20	20	40
Proba mixta	A1 A3 A4 A10 A14 A20	4	0	4
Atención personalizada		0	0	0
*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.
Glosario	Elaboración dunha lista de conceptos clave (termos, autores, ecuacións típicas, ...), coa súa explicación, que xorden en cada tema. É unha actividade de Moodle na que o número de conceptos por alumno é limitado, buscando a máxima participación.
Seminario	Esta actividade realizarase en grupos reducidos. Algúns conceptos serán enfatizados mediante o desenvolvemento detallado de exercicios estándar e resolveranse as dúbidas plantexadas polo alumno.
Proba de ensaio	Periódicamente ao final de cada unidade temática, incluído o/s seminario/s correspondente, proporase unha proba / ensaio durante as clases do seminario, para que o alumno poida demostrar o uso e participación nestas sesións. Contémplase que se faga a través de Moodle en datas concretas e nun tempo determinado. O obxectivo non só é facer un seguimento da evolución dos estudantes, senón tamén impulsar o sistema de avaliación continua.
Prácticas de laboratorio	Realizaranse experimentos relacionados cos conceptos abordados no curso. Constará de tres fases: O primeiro refírese a completar un cuestionario a través de Moodle relacionado co/s experimento/s que corresponde desenvolver no laboratorio. O segundo inclúe o traballo do estudante no laboratorio: planificación do experimento, desenvolvemento e análise de resultados. O terceiro consiste na elaboración do informe de resultados, que de avaliará tendo en conta a súa presentación, xustificación metodolóxica e a interpretación, así como a comparación con resultados bibliográficos.
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
Glosario Seminario Prácticas de laboratorio	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, prácticas de laboratorio ou na preparación da proba final. Os profesores estarán a dispor dos alumnos para resolver calquer tipo de dúbidas sobre a asignatura no horario de atención das titorías. Os alumnos con dispensa académica disporán de titorías tanto presenciais como por correo electrónico ou Teams, sempre que o necesiten. Antes de realizar o traballo experimental, o alumno fará un guión do artigo científico que resume a experiencia que vai reproducir. Durante o desenrolo 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.

Avaliación

Metodoloxías	Competencias	Descrición	Cualificación
Glosario	A1 A14 B1	Elaboración dun glosario de termos / conceptos, ... que xorden en cada tema. Para obter a puntuación máxima, cada alumno deberá propoñer un máximo de dez termos que abranguen todos os temas do contido.	10



Prácticas de laboratorio	A19 A20 A22 A23 A25 A27 B1 B3 B4 C3	Na avaliación desta actividade terase en conta o cuestionario Moodle, o traballo de laboratorio e o Informe de resultados (escrito ou como exposición oral): -Comprensión do guión do (s) experimento (s) a través dun cuestionario en Moodle antes do desenvolvemento do experimento no laboratorio. -Desenvolvemento do experimento no laboratorio: planificación, recollida de datos e análise. -Informe de laboratorio que reflicte a presentación e o tratamento cuantitativo dos resultados experimentais e a súa explicación a partir de modelos teóricos. os resultados obtidos e o informe preparado (escrito ou exposición oral).	15
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 as probas mixta e de ensaio. A puntuación obtida dunha actividade superada, manterase nas seguintes convocatorias do curso (segunda oportunidade). De non superar a proba mixta e de ensaio, aínda que a media das actividades sexa superior a 5, a calificación numérica que figure na Acta será a puntuación obtida nas probas. O alumno obterá a cualificación de Non Presentado cando non faga as prácticas de laboratorio e, por tanto, tampouco se presente as probas.	50
Proba de ensaio	A14 B3 C6	Ao longo do curso haberá catro / cinco probas curtas cunha duración inferior a 30 min, cada unha relacionada coas unidades temáticas do contido. O desenvolvemento a través de Moodle preferirase sempre que sexa posible.	25

Observacións avaliación

-A asistencia a totalidade das prácticas de laboratorio e a entrega do correspondente Informe son actividades obrigatorias pa todo o alumnado.
-A asistencia os seminarios non é obrigatoria para o alumno con dispensa académica. En caso de non poder participar nas probas de ensaio, a correspondente calificación sumarase a proba mixta. -Para superar a asignatura será necesario obter unha nota non inferior a 5.0 sobre 10 en todas as actividades evaluables. -A calificación de matrícula otorgarase preferentemente na primeira oportunidade. -Segunda oportunidade: repetición da proba mixta sobre contidos dos seminarios, prácticas e clases de teoría. Aqueles alumnos que non acadaron un 5.0 sobre 10 nas probas de ensaio, a calificación desta proba sumase a da proba mixta.

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 Xeral 1/610G01007

Química Xeral 2/610G01008

Química Xeral 3/610G01009

Laboratorio de Química 1/610G01010

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).
- Recoméndase coñecer inglés co 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