



FACULTADE DE QUÍMICA

# **Máster en Industria e Investigación Química**

**PROFUNDIZACIÓN EN QUÍMICA FÍSICA**

---

## **Guía Docente**

# Guía Docente.

## *1. Datos descriptivos de la materia.*

**Carácter:** Formación básica

**Convocatoria:** 1<sup>er</sup> cuatrimestre

**Créditos:** 3 ECTS

### **Profesorado:**

#### **Francisco José Penedo Blanco**

Profesor Titular del Departamento de Química Física e Ingeniería Química 1, Universidad de A Coruña

#### **Francisco Rivadulla Fernández**

Profesor Titular del Departamento de Química Física, Universidad de Santiago de Compostela

#### **Saulo Vázquez Rodríguez**

Profesor Titular del Departamento de Química Física, Universidad de Santiago de Compostela

#### **Pablo Hervés Beloso**

Profesor Catedrático del Departamento de Química Física, Universidad de Vigo

#### **M<sup>a</sup> Concepción Tojo Suárez**

Profesor Titular del Departamento de Química Física, Universidad de Vigo

**Idioma en que es impartida:** Castellano e inglés

## ***2. Situación, significado e importancia de la materia en el ámbito de la titulación.***

### **2.1. Módulo al que pertenece la materia en el Plan de Estudios. Materias con las que se relaciona.**

Módulo 1: Módulo de Formación Obligatoria Avanzada.

### **2.2. Papel que juega este curso en ese bloque formativo y en el conjunto del Plan de Estudios.**

Esta asignatura incluye contenidos de Química Física que no se han impartido en el Grado de Química y que son fundamentales para poder abordar contenidos de otras asignaturas del máster.

### **2.3. Conocimientos previos (recomendados/obligatorios) que los estudiantes han de poseer para cursar la asignatura.**

Los correspondientes al Grado en Química.

## ***3. Objetivos del aprendizaje y competencias a alcanzar por el estudiante con la asignatura.***

### **3.1. Objetivos del aprendizaje.**

- Entender conceptos y características de las fuerzas intermoleculares.
- Distinguir los distintos términos que componen la energía de interacción total entre moléculas.
- Comprender el significado y la información estructural proporcionada por la función de distribución radial en gases y en fases condensadas.
- Entender las propiedades termodinámicas y estructurales de las interacciones entre fases en contacto.
- Comprender los distintos enfoques en la modelización del comportamiento y la reactividad de las interfaces.

### **3.2. Competencias básicas y generales.**

- CG2. Identificar información de la literatura científica utilizando los canales apropiados e integrar dicha información para plantear y contextualizar un tema de investigación.
- CG5. Utilizar terminología científica en lengua inglesa para argumentar los resultados experimentales en el contexto de la profesión química.
- CG6. Aplicar correctamente las nuevas tecnologías de captación y organización de información para solucionar problemas en la actividad profesional.
- CG7. Ser capaz de trabajar en equipo y adaptarse a equipos multidisciplinares.
- CB6. Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación.
- CB7. Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.
- CB9. Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades.
- CB10. Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.

### **3.3. Competencias específicas.**

- CE1 - Definir conceptos, principios, teorías y hechos especializados de las diferentes áreas de la Química.
- CE2 - Proponer alternativas para la resolución de problemas químicos complejos de las diferentes especialidades químicas.
- CE4 - Innovar en los métodos de síntesis y análisis químico relacionados con las diferentes áreas de la Química.

## • 4. Contenidos del curso.

### 4.1. Epígrafes del curso:

#### *Contenidos teóricos:*

**Tema 1.** Propiedades eléctricas de las moléculas.

**Tema 2.** Interacciones intermoleculares.

**Tema 3.** Interacciones intermoleculares en líquidos: función de distribución radial.

**Tema 4.** Conceptos generales sobre interfases.

**Tema 5.** Termodinámica de las interacciones en la interfase.

**Tema 6.** Modelos teóricos de estudio estructural de las interfases.

**Tema 7.** Técnicas experimentales de estudio y caracterización de interfases.

### 4.2. Bibliografía recomendada

#### 4.2.1. Básica (Libros de texto).

P. Atkins, J. de Paula: **Physical Chemistry**, 10th ed.; Oxford University Press, **2014**

I. N. Levine: **Fisicoquímica**, 5th ed.; McGraw-Hill, **2004**

Las ediciones previas a las especificadas también son válidas para esta asignatura.

#### 4.2.2. Complementaria (Libros especializados).

J.M. Hollas: **Modern Spectroscopy**; 4th ed.; John Wiley&Sons, **2004**.

S.R. Morrison: **The Chemical Physics of Surfaces**; 2nd ed.; Plenum Press, **1990**.

F. MacRitchie: **Chemistry at Interfaces**; Academic Press, **1990**.

D. Myers: **Surfaces, Interfaces and Colloids: Principles and Applications**; VCH, **1999**.

## TEMA 1. Propiedades eléctricas de las moléculas.

### 1. Sentido del tema (Introducción)

En este tema se analizarán las propiedades moleculares que juegan un papel fundamental en las fuerzas intermoleculares: los momentos dipolares eléctricos y las polarizabilidades moleculares.

### 2. Epígrafes del tema.

Momentos dipolares eléctricos. Polarizabilidades. Permitividades relativas.

### 3. Bibliografía

P. Atkins, J. de Paula: **Physical Chemistry**, 10th ed.; Oxford University Press, **2014**.

### 4. Actividades a desarrollar.

Resolver los ejercicios indicados por el profesor y entregarlos en la fecha indicada en el *calendario de actividades de la materia* (el alumno debe guardar una copia del trabajo entregado). En el seminario correspondiente a este tema, los alumnos resolverán estos ejercicios en la pizarra.

Aquellos alumnos que tengan especial dificultad con los ejercicios que se realizan en este tema deberán contactar con el profesor para recibir el apoyo necesario.

## TEMA 2. Interacciones intermoleculares.

### 1. Sentido del tema (Introducción)

Entender el origen de las interacciones entre moléculas y cómo la interacción total puede dividirse entre diferentes términos con significado físico. Conocer las expresiones analíticas más usadas para describir potenciales intermoleculares.

### 2. Epígrafes del tema.

Interacciones dipolo-dipolo. Interacción de dispersión. Enlaces de hidrógeno. Interacción hidrofóbica. Interacción total: potenciales intermoleculares.

### 3. Bibliografía

P. Atkins, J. de Paula: **Physical Chemistry**, 10th ed.; Oxford University Press, 2014.

### 4. Actividades a desarrollar.

Resolver los ejercicios indicados por el profesor y entregarlos en la fecha indicada en el *calendario de actividades de la materia* (el alumno debe guardar una copia del trabajo entregado). En el seminario correspondiente a este tema, los alumnos resolverán estos ejercicios en la pizarra.

Aquellos alumnos que tengan especial dificultad con los ejercicios que se realizan en este tema deberán contactar con el profesor para recibir el apoyo necesario.

## TEMA 3. Interacciones intermoleculares en líquidos: función de distribución radial.

### 1. Sentido del tema (Introducción)

Comprender las repercusiones de las interacciones intermoleculares sobre la estructura de medios condensados. Entender el significado de la función de distribución radial y cómo extraer información estructural a partir de esta función.

### 2. Epígrafes del tema.

Función de distribución radial. Cálculo de la función de distribución radial.

### 3. Bibliografía

P. Atkins, J. de Paula: **Physical Chemistry**, 10th ed.; Oxford University Press, 2014.

### 4. Actividades a desarrollar.

Resolver los ejercicios indicados por el profesor y entregarlos en la fecha indicada en el *calendario de actividades de la materia* (el alumno debe guardar una copia del trabajo entregado). En el seminario correspondiente a este tema, los alumnos resolverán estos ejercicios en la pizarra.

Aquellos alumnos que tengan especial dificultad con los ejercicios que se realizan en este tema deberán contactar con el profesor para recibir el apoyo necesario.

## TEMA 4. Conceptos generales sobre interfases.

### 1. Sentido del tema (Introducción)

Conocer los conceptos generales de carácter estructural y termodinámico que caracterizan las interfases.

### 2. Epígrafes del tema.

Interfases como frontera entre sistemas. Desequilibrio energético. Energía libre de Gibbs de exceso. Particularidades de las interfases líquido-fase fluida y sólido-fase fluida. Movilidad molecular en sólidos. Factores que influyen en la energía libre superficial de exceso.

### 3. Bibliografía

P. Atkins, J. de Paula: **Physical Chemistry**, 10th ed.; Oxford University Press, 2014.

I. N. Levine: **Fisicoquímica**, 5th ed.; McGraw-Hill, **2004**.

#### **4. Actividades a desarrollar.**

Resolver los ejercicios indicados por el profesor y entregarlos en la fecha indicada en el *calendario de actividades de la materia* (el alumno debe guardar una copia del trabajo entregado). En el seminario correspondiente a este tema, los alumnos resolverán estos ejercicios en la pizarra.

Aquellos alumnos que tengan especial dificultad con los ejercicios que se realizan en este tema deberán contactar con el profesor para recibir el apoyo necesario.

### **TEMA 5. Termodinámica de las interacciones en la interfase.**

#### **1. Sentido del tema (Introducción)**

Comprender los fundamentos termodinámicos propios de las interfases.

#### **2. Epígrafes del tema.**

Interfases líquido-fase fluida. Interfases sólido-fase fluida. Clasificación en función de las fuerzas intermoleculares y de la energía involucrada en la interacción: fisisorción y quimisorción. Monocapas y multicapas de adsorbato. Isotermas, tipos I a V. Determinación de áreas superficiales en sólidos, método BET. Histéresis en adsorción-desorción.

#### **3. Bibliografía**

P. Atkins, J. de Paula: **Physical Chemistry**, 10th ed.; Oxford University Press, **2014**.

I. N. Levine: **Fisicoquímica**, 5th ed.; McGraw-Hill, **2004**.

#### **4. Actividades a desarrollar.**

Resolver los ejercicios indicados por el profesor y entregarlos en la fecha indicada en el *calendario de actividades de la materia* (el alumno debe guardar una copia del trabajo entregado). En el seminario correspondiente a este tema, los alumnos resolverán estos ejercicios en la pizarra.

Aquellos alumnos que tengan especial dificultad con los ejercicios que se realizan en este tema deberán contactar con el profesor para recibir el apoyo necesario.

### **TEMA 6. Modelos teóricos de estudio estructural de las interfases.**

#### **1. Sentido del tema (Introducción)**

Conocer los modelos teóricos más usados para describir las propiedades estructurales de las interfases.

#### **2. Epígrafes del tema.**

Conceptos básicos. La doble capa eléctrica en la interfase. Transferencia de carga. Aplicación al estudio de agregados coloidales y a transferencias de carga eléctrica.

#### **3. Bibliografía**

P. Atkins, J. de Paula: **Physical Chemistry**, 10th ed.; Oxford University Press, **2014**.

I. N. Levine: **Fisicoquímica**, 5th ed.; McGraw-Hill, **2004**.

#### **4. Actividades a desarrollar.**

Resolver los ejercicios indicados por el profesor y entregarlos en la fecha indicada en el *calendario de actividades de la materia* (el alumno debe guardar una copia del trabajo entregado). En el seminario correspondiente a este tema, los alumnos resolverán estos ejercicios en la pizarra.

Aquellos alumnos que tengan especial dificultad con los ejercicios que se realizan en este tema deberán contactar con el profesor para recibir el apoyo necesario.

## TEMA 7. Técnicas experimentales de estudio y caracterización de interfases.

### 1. Sentido del tema (Introducción)

Mostrar las bases de las técnicas experimentales más importantes que se utilizan en la actualidad para el estudio de las interfases.

### 2. Epígrafes del tema.

Espectroscopia fotoelectrónica. Microscopías.

### 3. Bibliografía

J.M. Hollas: **Modern Spectroscopy**; 4th ed.; John Wiley&Sons, **2004**.

S.R. Morrison: **The Chemical Physics of Surfaces**; 2nd ed.; Plenum Press, **1990**.

F. MacRitchie: **Chemistry at Interfaces**; Academic Press, **1990**.

D. Myers: **Surfaces, Interfaces and Colloids: Principles and Applications**; VCH, **1999**.

### 4. Actividades a desarrollar.

Resolver los ejercicios indicados por el profesor y entregarlos en la fecha indicada en el *calendario de actividades de la materia* (el alumno debe guardar una copia del trabajo entregado). En el seminario correspondiente a este tema, los alumnos resolverán estos ejercicios en la pizarra.

Aquellos alumnos que tengan especial dificultad con los ejercicios que se realizan en este tema deberán contactar con el profesor para recibir el apoyo necesario.

## 5. - Indicaciones metodológicas y atribución de carga ECTS.

### 5.1. Atribución de créditos ECTS.

TRABAJO PRESENCIAL EN EL AULA	HORAS	TRABAJO PERSONAL DEL ALUMNO	HORAS
Clases expositivas en grupo grande	18	Estudio autónomo individual o en grupo	31
Clases interactivas en grupo reducido (Seminarios)	4	Resolución de ejercicios, u otros trabajos	10
Clases interactivas con ordenador en grupo reducido		Resolución de ejercicios, prácticas con ordenador	
Tutorías en grupo muy reducido	2	Preparación de presentaciones orales, escritas, elaboración de ejercicios propuestos. Actividades en biblioteca o similar	10
<b>Total horas trabajo presencial en el aula</b>	<b>24</b>	<b>Total horas trabajo personal del alumno</b>	<b>51</b>

### 5.2. Actividades formativas en el aula con presencia del profesor

A) *Clases expositivas en grupo grande* ("L" en las *tablas horarias*): Lección impartida por el profesor que puede tener formatos diferentes (teoría, problemas y/o ejemplos generales, directrices generales de la materia...). El profesor puede contar con apoyo de medios audiovisuales e informáticos pero, en general, los estudiantes no necesitan manejarlos en clase. Habitualmente estas clases seguirán contenidos detallados la bibliografía propuesta en la *Guía Docente* de la asignatura. La asistencia a estas clases no es obligatoria, pero resulta muy recomendable.

B) *Clases interactivas en grupo reducido* (*Seminarios*, "S" en las *tablas horarias*): Clase teórico/práctica en la que se proponen y resuelven aplicaciones de la teoría, problemas, ejercicios... El alumno participa activamente en estas clases de distintas formas: entrega de ejercicios al profesor (algunos de los propuestos en *boletines de problemas* que el profesor entrega a los alumnos con la suficiente antelación); resolución de ejercicios en el aula, etc. El profesor puede contar con apoyo de medios audiovisuales e informáticos pero, en general, los estudiantes no los manejarán en clase. Se incluyen las pruebas de evaluación si las hubiere. La asistencia a estas clases es obligatoria.

C) *Tutorías de pizarra en grupo muy reducido* ("T" en las *tablas horarias*): Tutorías programadas por el profesor y coordinadas por el Centro. En general, supondrán para cada alumno 2 horas por cuatrimestre y asignatura. Se proponen actividades como la supervisión de trabajos dirigidos, aclaración de dudas sobre teoría o las prácticas, problemas, ejercicios, lecturas u otras tareas propuestas; así como la presentación, exposición, debate o comentario de trabajos individuales o realizados en pequeños grupos. En muchos casos el profesor exigirá a los alumnos la entrega de ejercicios previa a la celebración de la tutoría. Estas entregas vendrán recogidas en el calendario de actividades que van a realizar los alumnos a lo largo del curso en la *Guía Docente* de la asignatura correspondiente. La asistencia a estas clases es obligatoria.

### 5.3. Recomendaciones para el estudio de la materia

- Es muy importante asistir a las clases expositivas.
- Es fundamental mantener el estudio de la materia "al día".
- Una vez finalizada la lectura de un tema, es útil hacer un resumen de los puntos importantes.
- La resolución de problemas es clave para el aprendizaje de esta materia. Puede resultar de ayuda empezar por los problemas resueltos en los manuales de apoyo, para seguir después con los problemas propuestos al final de cada capítulo.



- 5.4. Calendario de actividades.

**Septiembre 2014**

<b>Lunes</b>	<b>Martes</b>	<b>Miércoles</b>	<b>Jueves</b>	<b>Viernes</b>
<b>15</b>	<b>16</b>	<b>17</b>	<b>18</b>	<b>19</b>
<b>18-20 h</b>		<b>18-20 h</b>		
<b>22</b>	<b>23</b>	<b>24</b>	<b>25</b>	<b>26</b>
<b>18-20 h</b>		<b>18-20 h</b>		
<b>29</b>	<b>30</b>			
<b>18-20 h</b>				

**Octubre 2014**

<b>Lunes</b>	<b>Martes</b>	<b>Miércoles</b>	<b>Jueves</b>	<b>Viernes</b>
		<b>1</b>	<b>2</b>	<b>3</b>
		<b>18-20 h</b>		
<b>6</b>	<b>7</b>	<b>8</b>	<b>9</b>	<b>10</b>
<b>18-20 h</b>		<b>18-20 h</b>		
<b>13</b>	<b>14</b>	<b>15</b>	<b>16</b>	<b>17</b>
<b>18-20 h</b>		<b>18-20 h</b>		
<b>20</b>	<b>21</b>	<b>22</b>	<b>23</b>	<b>24</b>
<b>18-20 h</b>		<b>18-20 h</b>		
<b>27</b>	<b>28</b>	<b>29</b>	<b>30</b>	<b>31</b>
<b>EXAMEN</b>				

## ***6. Indicaciones sobre la evaluación.***

### **6.1. Procedimiento de evaluación.**

La evaluación de esta materia se hará mediante evaluación continua y la realización de un examen final, estando condicionado el acceso al examen a la participación en al menos el 80% de las actividades docentes presenciales de asistencia obligatoria (seminarios y tutorías).

El profesor verificará la asistencia a las clases según el sistema de control de asistencias oficial establecido en cada Centro o Universidad. Las ausencias deberán ser justificadas documentalmente. Las ausencias justificadas contabilizarán como asistencia a las actividades docentes, a efectos de poder presentarse al examen.

La evaluación continua (N1) tendrá un peso del 25% en la calificación de la asignatura y constará de tres componentes: resolución de problemas y casos prácticos (10%), asistencia y participación en las clases (5%), y evaluación del/a estudiante mediante preguntas y cuestiones orales durante el curso (10%). Los seminarios y las tutorías incluirán ejercicios y trabajos realizados presencialmente y entregados al profesor.

El examen final (N2) tendrá un peso del 75% y versará sobre la totalidad de los contenidos de la asignatura.

La calificación del alumno se obtendrá cómo resultado de aplicar la fórmula siguiente:

$$\text{Nota final} = 0.25 \times \text{N1} + 0.75 \times \text{N2}$$

Siendo N1 la nota numérica correspondiente a la evaluación continua (escala 0-10) y N2 la nota numérica del examen final (escala 0-10).

En todo caso, para aprobar la asignatura, será requisito imprescindible alcanzar una nota final mínima de 5.0 (escala 0-10).

Los alumnos repetidores tendrán el mismo régimen de asistencia a las clases que los que cursan la asignatura por primera vez.

### **6.2. Recomendaciones de cara a la evaluación.**

El alumno debe repasar los conceptos teóricos introducidos en los distintos temas utilizando el la bibliografía recomendada. El grado de acierto en la resolución de los ejercicios propuestos proporciona una medida de la preparación del alumno para afrontar el examen final de la asignatura. Aquellos alumnos que encuentren dificultades importantes a la hora de trabajar las actividades propuestas deben acudir en las horas de tutoría del profesor, con el objetivo de que éste pueda analizar el problema y ayudar a resolver dichas dificultades.

### **6.3. Recomendaciones de cara a la recuperación.**

El profesor analizará con aquellos alumnos que no superen con éxito el proceso de evaluación, y así lo deseen, las dificultades encontradas en el aprendizaje de los contenidos de la asignatura. También les proporcionará material adicional (cuestiones, ejercicios, exámenes, etc.) para reforzar el aprendizaje de la materia.