

Presentación QF III

Iñaki Tuñón

Edificio **E**, 3ª Planta, despacho 5342

Javier Ruiz

Edificio **E**, 3ª Planta, despacho 5308

Tutorías:

Presenciales Lunes de 12 a 13:30 h
Martes de 12 a 13:30 h

Lunes de 16 a 19 h

Virtuales ignacio.tunon@uv.es

j.javier.ruiz@uv.es

Presentación QF III

Química Física I

- Termodinámica
- Cinética Formal
- Electroquímica

Descripción
Macroscópica

Química Física II

- Química Cuántica
- Espectroscopía

Descripción
Microscópica

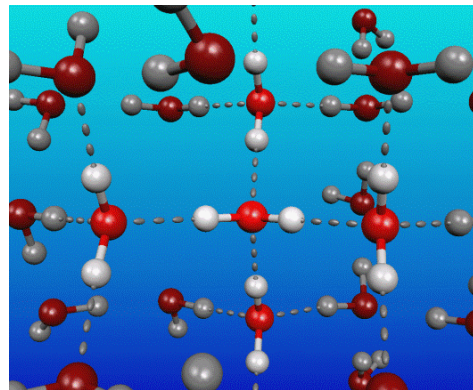
Presentación QF III

Química Física I



Descripción
Macroscópica

Química Física II



Descripción
Microscópica

Química Física III

- ⇒ Relacionar ambas descripciones
- ⇒ Completar

Presentación QF III

Química Física III (Contenido)

- Tema 1. Termodinámica Estadística: Fundamentos y Sistemas de Partículas Independientes
- Tema 2. Cinética Molecular
- Tema 3. Fenómenos de Transporte y Conductividad Electrolítica

- Tema 4. Fenómenos de Superficie
- Tema 5. Catálisis Heterogénea y Cinética Electrónica
- Tema 6. Introducción a los sistemas Macromoleculares y Coloidales

Presentación QF III

Química Física III (Contenido)

Tema 1. Termodinámica Estadística: Fundamentos y Sistemas de Partículas Independientes

1.- Introducción a la Termodinámica Estadística

1.1. Origen de la Termodinámica Estadística

1.2. Estados de un Sistema. Relación entre las Propiedades Macroscópicas y Microscópicas de un Sistema.

2.- ¿Cómo se calculan las propiedades termodinámicas? El concepto de colectivo

2.1. Probabilidad de un Microestado en el Colectivo Canónico

2.2. Funciones Termodinámicas en el Colectivo canónico.

2.3. Propiedades e interpretación de la Función de partición canónica.

3.-Función de Partición en Sistemas de Partículas no Interactuantes.

4.- Función de Partición Molecular.

5.- Propiedades Termodinámicas del Gas Ideal.

6.- La constante de equilibrio entre gases ideales.

Presentación QF III

Química Física III (Contenido)

Tema 2. Cinética Molecular

2.1. Introducción

2.2. Teoría de Colisiones

2.2.1. Velocidades Moleculares

2.2.1.1. Funciones de distribución de la velocidad

2.2.1.2. Obtención de las funciones de distribución de la velocidad

2.2.2. Velocidades Características

2.2.3. Distribución de Energías

2.2.4. Colisiones con las Paredes. Efusión

2.2.5. Colisiones Intermoleculares y recorrido libre medio

2.2.6. Colisiones y Reactividad Química

2.3. Superficies de Energía Potencial

2.4. Teoría del Estado de Transición

2.4.1. Hipótesis básicas y desarrollo

2.4.2. Formulación termodinámica de la TET

2.4.3. Limitaciones de la TET

Presentación QF III

Química Física III (Contenido)

Tema 3. Fenómenos de Transporte y Conductividad Electrolítica

3.1.- Introducción

- 3.1.1.- Descripción macroscópica de estados de no equilibrio.
- 3.1.2.- Definición de conceptos básicos.
- 3.1.3.- Leyes fenomenológicas. $\vec{J} = -L \cdot \nabla X$.

3.2.- Tipos de procesos de transporte y propiedades transportadas.

- 3.2.1.- Conducción térmica . Ley de Fourier.
- 3.2.2.- Viscosidad. Ley de Newton. Ley de Poiseuille.
- 3.2.3.- Difusión. Primera ley de Fick.
- 3.2.4.- Conducción iónica: Conductividad eléctrica. Ley de Ohm. Migración.

3.3.- Punto de vista microscópico. Fenómenos de transporte en gas de esferas rígidas.

- 3.3.1.- Coeficiente de conductividad térmico, κ .
- 3.3.2.- Coeficiente de viscosidad, η .
- 3.3.3.- Coeficiente de difusión, D .

3.4.- Ecuación general de la difusión.

- 3.4.1.- Segunda ley de Fick.
- 3.4.2.- Soluciones de la ecuación de difusión.
- 3.4.3.- Descripción microscópica de la difusión en líquidos.
 - 3.4.3.1. Ecuación de Langevin.
 - 3.4.3.2. Movilidad iónica. Relación de Einstein. Relación de Nernst-Einstein.

Presentación QF III

Química Física III (Contenido)

Tema 4. Fenómenos de Superficie

4.1.- Interfase líquida

4.1.1.- Tensión superficial

4.1.2.- Interfases curvas

4.1.2.1.- Ecuación de Young-Laplace

4.1.2.2.- Presión de vapor en superficies curvas

4.1.2.3.- Capilaridad

4.1.3.- Sistemas multicomponentes

4.2.- Interfase sólida

4.2.1.- Fisisorción y quimisorción

4.2.2.- Isotermas de adsorción

4.2.2.1.- Isotherma de Langmuir

4.2.2.2.- Extensiones de la Isotherma de Langmuir

4.2.2.3.- Efecto de la temperatura sobre el equilibrio de adsorción

4.2.2.4.- Limitaciones en la isoterma de Langmuir

4.2.3.- Otras isotermas

4.3.- Interfases electrizadas

4.3.1.- Introducción

4.3.2.- Termodinámica de la interfase electrizada

4.3.3.- Estructura de la interfase electrizada

4.3.3.1.- Modelo de Helmholtz-Perrin o de doble capa rígida

4.3.3.2.- Modelo de Gouy-Chapman o de doble capa difusa

4.3.3.3.- Modelo de Stern

Presentación QF III

Química Física III (Contenido)

Tema 5. Catálisis Heterogénea y Cinética Electrónica

5.1.- Introducción

5.2.- Características de los fenómenos catalíticos

5.2.1.- Mecanismo General de la Catálisis

5.2.2.- Características de la catálisis heterogénea

5.2.3.- Etapas de la catálisis heterogénea

5.2.4.- Ejemplos de catálisis

5.3.- Introducción a la Cinética Electrónica

5.3.1. Mecanismo general

5.3.2. Ley de velocidad de la transferencia electrónica

5.3.3. Relación entre corriente y velocidad de reacción. Ecuación de Butler-Volmer

5.3.4. Formas aproximadas de la relación entre corriente y velocidad de reacción.

5.4.- Ejercicios adicionales

Presentación QF III

Química Física III (Contenido)

Tema 6. Macromoléculas y Coloides

- 6.1. Introducción
 - 6.1.1. Historia
 - 6.1.2. Definiciones y características
- 6.2. Clasificación y tipos de polímeros
 - 6.2.1. Clasificación según la composición de los monómeros
 - 6.2.2. Clasificación según el origen
 - 6.2.3. Clasificación según la estructura de la cadena
 - 6.2.4. Clasificación por comportamiento térmico
 - 6.2.5. Clasificación por el mecanismo de polimerización
 - 6.2.6. Clasificación según la aplicación
- 6.3. Distribución de tamaños moleculares. Masas moleculares promedio
- 6.4. Propiedades físicas de los polímeros
- 6.5. Termodinámica de polímeros en disolución
 - 6.5.1. Entropía de mezcla según la teoría de Flory-Huggins
 - 6.5.2. Evaluación de la variación de energía libre de mezcla
 - 6.5.3. Comparación de la teoría con resultados experimentales
 - 6.5.4. Solubilidad de polímeros y equilibrios de fases
 - 6.5.5. Limitaciones de la teoría de Flory-Huggins

Presentación QF III

Química Física Avanzada (Metodología)

⇒ *Clases de Teoría (48 horas)*

Exposición de las líneas fundamentales de cada tema y resolución de problemas tipo

⇒ *Tutorías (9 horas por subgrupo)*

Resolución participativa de problemas y actividades relacionadas con el temario

Presentación QF III

Química Física Avanzada (Metodología)

⇒ Material de Trabajo

- Bibliografía

- www.uv.es/tunon

Apuntes, problemas, tutorías...

Exámenes resueltos

- Aula Virtual

Apuntes, tutorías, exámenes, ...

Cuestionarios on line

Presentación QF III

Química Física Avanzada (Metodología)

<https://www.uv.es/tunon/QFIII.htm>

MATERIAL GENERICO

- Formulario, constantes y unidades en [pdf](#)
- Guía docente de la asignatura en [pdf](#)
- Ficha del alumno en [pdf](#)
- [Presentación](#) de la asignatura
- [Exámenes](#)

Tutorías

- [Tutoría 1, solución](#) y [material sobre funciones de distribución](#)
- [Tutoría 2 y solución](#)
- [Tutoría 3 y solución](#)
- [Tutoría 4 y solución](#)
- [Tutoría 5 y solución](#)
- [Tutoría 6 y solución](#)
- [Tutoría 7 y solución](#)

TEMA 1

- Tema Termodinámica Estadística en [pdf](#)
- Problemas Termodinámica Estadística en [pdf](#)
- [Problema](#) adicional
- [Presentación](#) tema

TEMA 2

- Tema Cinética Molecular en [pdf](#)
- Problemas Cinética Molecular en [pdf](#)
- [Presentación](#) tema

TEMA 3

- Tema Fenómenos de Transporte en [pdf](#)
- Problemas en [pdf](#)
- Presentación del tema en [pdf](#)

⇒ Material de Trabajo

• [Bibliografía](#)

• www.uv.es/tunon

• [Aula Virtual](#)

Apuntes, problemas, tutorías...

Exámenes resueltos

Apuntes, tutorías
Cuestionarios on line

Presentación QF III

Química Física Avanzada (Metodología)

<https://www.uv.es/tunon/QFIII.htm>

Exámenes

- [Enero 2013](#)
- [Julio 2013](#)
- [Enero 2014](#)
- [Julio 2014](#)
- [Enero 2015](#)
- [Julio 2015](#)
- [Enero 2016](#)
- [Julio 2016](#)
- [Enero 2017](#)
- [Junio 2017](#)
- [Enero 2018](#)
- [Julio 2018](#)
- [Mayo 2019](#)
- [Junio 2019](#)

⇒ Material de Trabajo

• [Bibliografía](#)

• www.uv.es/tunon

• [Aula Virtual](#)

Apuntes, problemas, tutorías...

Exámenes resueltos

Apuntes, tutorías
Cuestionarios on line

Presentación QF III

Química Física Avanzada (**Calificación**)

Vía Presencial (opción por defecto)

Examen 70% (fechas: 09/06/2021 y 01/07/2021)

Nota mínima 4

Evaluación continua 30 %

Nota mínima 4

Cuestionarios por tema (aulavirtual)

Participación en tutorías y actividades

Se aprueba con una nota total ≥ 5

Presentación QF III

Se abrirá el cuestionario del Tema 1 en el AV

↑
10 % del total de la nota
1 intento
10 preguntas → 4 opciones, 1 correcta
10 ~ 13 minutos
4 días para realizarlo (de V a L)

01/Febrero



Tema 1

Tema 2

10/Febrero

24/Febrero

10/Marzo

3/Febrero



Tutoría 1

Tutoría 2

Tutoría 3

1 semana antes de la tutoría se abrirán los ejercicios a trabajar

20% de la nota
entregables
participación activa en la tutoría

Presentación QF III

Química Física Avanzada (Calificación)

Vía No Presencial

Examen 100% (fechas: 09/06/2021 y 01/07/2021)

Se aprueba con una nota total ≥ 5

La elección de esta opción se deberá comunicar por **email a los profesores** antes del 01 de Marzo. Después no se admitirán cambios.