

**Datos de la Asignatura**

<b>Código</b>	34195
<b>Nombre</b>	Química Física III
<b>Ciclo</b>	Grado
<b>Créditos ECTS</b>	6.0
<b>Curso académico</b>	2018 - 2019

**Titulación(es)**

Titulación	Centro	Curso	Periodo
1110 - Grado de Química V2-2018	FACULTAT DE QUÍMICA	3	Segundo cuatrimestre

**Materias**

Titulación	Materia	Carácter
1110 - Grado de Química V2-2018	7 - Química Física	Obligatoria

**Coordinación**

Nombre	Departamento
TUÑÓN GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO	315 - QUÍMICA FÍSICA

**RESUMEN**

La asignatura Química Física III es una asignatura obligatoria que se imparte en el sexto semestre. En el plan de estudios actualmente en vigor consta de un total de 6.0 créditos ECTS.

Con esta asignatura se pretende, esencialmente, que el alumno complete e integre su formación químico-física. En las asignaturas de Química Física I y II el alumno ha adquirido conocimientos de las visiones macroscópicas (fundamentalmente Termodinámica) y microscópicas (Cuántica) de la materia. En esta asignatura se pretende iniciar al alumno en el carácter complementario de ambas visiones, mostrando como la Termodinámica Estadística permite el cálculo de las propiedades macroscópicas de la materia a partir de las propiedades microscópicas de sus constituyentes. Además de este propósito fundamental, se pretende formar al alumno en otros conocimientos químico-físicos todavía no adquiridos, tales como los fenómenos de superficies y los polímeros.



## CONOCIMIENTOS PREVIOS

### Relación con otras asignaturas de la misma titulación

#### 1110 - Grado de Química V2-2018 :

##### R4-OBLIGACIÓN DE HABER SUPERADO PREVIAMENTE LA ASIGNATURA

34183 - Química General I

34184 - Química General II

##### R5-OBLIGACIÓN DE CURSAR SIMULTÁNEAMENTE LA ASIGNATURA

34194 - Química Física II

### Otros tipos de requisitos

A fin de poder abordar con éxito la asignatura, es imprescindible que el estudiante posea una serie de conocimientos previos. Dichos conocimientos comprenden:

Manejo de conceptos termodinámicos (energía interna, entropía y energía libre, espontaneidad y equilibrio) y de cinética básica (mecanismo, etapa lenta, orden de reacción, ecuaciones integradas). Manejo de conceptos cuánticos, tales como función de onda, estados y niveles. Conocimiento de las soluciones de sistemas modelo (partícula en la caja, rotor rígido)

Cálculo básico de derivadas e integrales.

Manejo de los diferentes sistemas de unidades.

## COMPETENCIAS

### 1108 - Grado de Química

CE3  
CE6  
CE5  
CE11  
CE13  
CE14  
CE15  
CE24  
CE16  
CE20  
CE22  
CE23  
CE24  
CG1  
CG2  
CG4  
CG6  
CT2  
CB3

**RESULTADOS DE APRENDIZAJE**

En esta asignatura se abordan parte de los resultados de aprendizaje de la materia **Química Física** contenidos en el documento VERIFICA que permiten adquirir, tanto conocimientos específicos de Química, como habilidades y competencias cognitivas y competencias generales recomendadas por la EUROPEAN CHEMISTRY THEMATIC NETWORK (ECTN) for the Chemistry Eurobachelor® Label. En la siguiente tabla se relacionan los resultados de aprendizaje adquiridos en la asignatura de **Química Física 3** relacionados con las competencias del grado en Química.

<b>CONOCIMIENTOS ESPECÍFICOS DE QUÍMICA</b>	
<b>El proceso de aprendizaje debe permitir a los titulados de grado demostrar:</b>	
	<b>Competencias de la asignatura Química Física III que contemplan los resultados de aprendizaje EUROBACHELOR®</b>
Las características de los diferentes estados de la materia y las teorías utilizadas para describirlos.	Demostrar que conoce las características y comportamiento de los diferentes estados de la materia y las teorías empleadas para describirlos (CE3).
Los principios de la termodinámica y su aplicación a la química.	Demostrar que conoce los principios de termodinámica y cinética y sus aplicaciones en Química (CE6).
Los principios de la mecánica cuántica y su aplicación a la descripción de la estructura y propiedades de los átomos y moléculas.	Demostrar que conoce los principios de la Mecánica Cuántica y su aplicación a la descripción de la estructura y propiedades de átomos y moléculas (CE5).
La cinética del cambio químico, incluida la catálisis; la interpretación mecánica de las reacciones químicas.	Demostrar que conoce los principios de termodinámica y cinética y sus aplicaciones en Química (CE6).
La relación entre propiedades en masa y propiedades de átomos y moléculas individuales, incluyendo macromoléculas (naturales y sintéticas), polímeros y otros materiales relacionados.	Relacionar las propiedades macroscópicas y propiedades de átomos y moléculas individuales, incluyendo macromoléculas (naturales y sintéticas), polímeros, coloides y otros materiales (CE11).

<b>COMPETENCIAS Y HABILIDADES COGNITIVAS</b>	
<b>El proceso de aprendizaje debe permitir a los titulados de grado demostrar:</b>	
	<b>Competencias del título de grado que contemplan los resultados de aprendizaje EUROBACHLEOR®</b>
Capacidad para demostrar conocimiento y comprensión de los hechos, conceptos, principios y teorías fundamentales relacionadas con los temas mencionados anteriormente.	Demostrar el conocimiento y comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionadas con las áreas de la Química (CE13).
Capacidad para aplicar dicho conocimiento y comprensión a la solución de problemas comunes cualitativos y cuantitativos.	Resolver problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados (CE14).
	Reconocer y analizar nuevos problemas y planear estrategias para solucionarlos (CE15).
	Comprender los aspectos cualitativos y cuantitativos de los problemas químicos (CE24).



Capacidad para el cálculo y el procesamiento de datos, relacionados con información y datos de química.	Resolver problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados (CE14). ----- Reconocer y analizar nuevos problemas y planear estrategias para solucionarlos (CE15).
---	--

COMPETENCIAS GENERALES	
El proceso de aprendizaje debe permitir a los titulados de grado demostrar:	
	<b>Competencias del título de grado que contemplan los resultados de aprendizaje EUROBACHLEOR®</b>
Capacidad para aplicar conocimiento práctico para la resolución de problemas relacionados con información cualitativa y cuantitativa.	Resolver problemas de forma efectiva (CG4). ----- Resolver problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados (CE14). ----- Relacionar teoría y experimentación (CE22). ----- Reconocer y valorar los procesos químicos en la vida diaria (CE23). ----- Comprender los aspectos cualitativos y cuantitativos de los problemas químicos (CE24).
Capacidades de cálculo y aritméticas, incluyendo aspectos tales como error de análisis, estimaciones de órdenes de magnitud, y uso correcto de las unidades.	Desarrollar capacidad de análisis, síntesis y razonamiento crítico (CG1). ----- Demostrar capacidad inductiva y deductiva (CG2). ----- Resolver problemas de forma efectiva (CG4).
Competencias de gestión de la información, en relación a fuentes primarias y secundarias, incluyendo recuperación de información a través de búsquedas <i>on-line</i> .	Demostrar habilidad para transmitir información, ideas, problemas y soluciones tanto a un público especializado como no especializado y utilizando si procede las tecnologías de la información (CG6). ----- Poseer habilidades básicas en tecnologías de la información y comunicación y gestionar adecuadamente la información obtenida (CT2).
Capacidad de analizar materiales y sintetizar conceptos.	Desarrollar capacidad de análisis, síntesis y razonamiento crítico (CG1). ----- Demostrar capacidad inductiva y deductiva (CG2). ----- Que los estudiantes tengan la capacidad de reunir e interpretar datos relevantes (normalmente dentro de su área de estudio) para emitir juicios que incluyan una reflexión sobre temas relevantes de índole social, científica o ética (CB3).
Capacidad de adaptarse a nuevas situaciones y tomar decisiones.	Demostrar capacidad para adaptarse a nuevas situaciones (CG9). ----- Reconocer y analizar nuevos problemas y planear estrategias para solucionarlos (CE15). ----- Que los estudiantes tengan la capacidad de reunir e interpretar datos relevantes (normalmente dentro de su área de estudio) para emitir juicios que incluyan una reflexión sobre temas relevantes de índole social, científica o ética (CB3).



Competencias de comunicación oral y escrita, en uno de los principales idiomas europeos, además del idioma del país de origen.	Demostrar capacidad de trabajo en equipo incluyendo equipos de carácter interdisciplinar y en un contexto internacional (CG5). ----- Comprometerse con la ética, los valores de igualdad y la responsabilidad social como ciudadano y como profesional (CG7). ----- Expresarse correctamente, tanto en forma oral como escrita, en cualquiera de las lenguas oficiales de la Comunidad Valenciana (CT1). ----- Que los estudiantes puedan transmitir información, ideas, problemas y soluciones a un público tanto especializado como no especializado (CB4). ----- Poseer habilidades básicas en tecnologías de la información y comunicación y gestionar adecuadamente la información obtenida (CT2).
Competencias de estudio necesarias para el desarrollo profesional. Éstas incluirán la habilidad de trabajar de forma autónoma.	Demostrar capacidad de gestión y dirección, espíritu emprendedor, iniciativa, creatividad, organización, planificación, liderazgo, toma decisiones y negociación (CG3). ----- Demostrar capacidad de trabajo en equipo incluyendo equipos de carácter interdisciplinar y en un contexto internacional (CG5). ----- Aprender de forma autónoma (CG8). ----- Demostrar capacidad para adaptarse a nuevas situaciones (CG9). ----- Que los estudiantes hayan desarrollado aquellas habilidades de aprendizaje necesarias para emprender estudios posteriores con un alto grado de autonomía (CB5).
Compromiso ético con el Código Europeo de conducta: <a href="http://ec.europa.eu/research/participants/data/ref/h2020/other/hi/h2020-ethics_code-of-conduct_en.pdf">http://ec.europa.eu/research/participants/data/ref/h2020/other/hi/h2020-ethics_code-of-conduct_en.pdf</a>	Adquirir una sensibilidad permanente por la calidad y el medio ambiente, el desarrollo sostenible y la prevención de riesgos laborales (CG10). ----- Comprometerse con la ética, los valores de igualdad y la responsabilidad social como ciudadano y como profesional (CG7). ----- Que los estudiantes tengan la capacidad de reunir e interpretar datos relevantes (normalmente dentro de su área de estudio) para emitir juicios que incluyan una reflexión sobre temas relevantes de índole social, científica o ética. (CB3).

Estos resultados del aprendizaje han de permitir que al acabar la asignatura Química Física III el estudiante sea capaz de:

### Tema 1

- Calcular probabilidades de ocupación de estados a partir de la energía y la temperatura.
- Calcular probabilidades de ocupación de niveles energéticos a partir de la energía y la temperatura. Aplicación a la resonancia magnética de espín.
- Calcular funciones de partición moleculares tanto como sumas explícitas como bajo las aproximaciones más habituales.



- 
- Interpretar el significado de la función de partición
  - Calcular, a partir de propiedades microscópicas, la energía interna, capacidad calorífica, entropía y energía libre de gases ideales formados por moléculas sencillas (mono, di y triatómicas).
  - Calcular la constante de equilibrio para reacciones entre gases ideales formados por moléculas sencillas.
  - Predecir el sentido del equilibrio y su cambio con la temperatura a partir de las energías fundamentales de reactivos y productos y la accesibilidad de los estados energéticos en ellos.

### Tema 2

- Calcular velocidades características de una muestra de gas en equilibrio.
- Calcular la frecuencia de colisión de las moléculas de un gas entre sí y con las paredes del recipiente. Calcular el recorrido libre medio de las moléculas de un gas.
- Calcular la constante de velocidad para una reacción entre gases a partir de la teoría de colisiones.
- Interpretar la superficie de energía potencial de un sistema reactivo. Localizar los puntos estacionarios y clasificarlos como especies estables (reactivos, productos, intermedios) o no (estado de transición). Trazar sobre estas superficies los caminos de reacción de mínima energía.
- Calcular la constante de velocidad para una reacción a partir de la teoría del estado de transición.
- Utilizar la formulación termodinámica de la teoría del estado de transición para interpretar la dependencia de la constante de velocidad con la temperatura. Cálculo de la entalpía, entropía y energía libre de activación.

### Tema 3

- Definir el concepto de *proceso de transporte* desde el punto de vista fenomenológico y macroscópico identificando a su vez cuándo un sistema se halla o no alejado de su estado de equilibrio termodinámico.
- Explicar y diferenciar los distintos tipos de procesos de transporte, en base a la magnitud termodinámica que es transportada.
- Explicar, deducir y aplicar las leyes generales y particulares de dichos fenómenos del transporte para los sistemas correspondientes.
- Explicar la ley de Kohlrausch así como la ley de migración independiente de los iones en disolución.
- Describir y explicar la evolución de un sistema en régimen no estacionario.
- Deducir y razonar la segunda ley de Fick de la Difusión.
- Aplicar las soluciones de la ecuación de difusión a problemas relacionados con la contaminación del medioambiente, y estudiar su carácter predictivo.



-Relacionar la movilidad iónica con la conductividad de los iones en disolución, deduciendo la ecuación de Nernst-Einstein de la difusión de los iones en disolución.

#### **Tema 4**

- Definir tensión superficial.
- Determinar el efecto de la tensión superficial en interfases curvas: influencia del radio de curvatura, presión de vapor al variar la curvatura, ascenso/descenso por un capilar.
- Explicar la variación de la tensión superficial con la concentración.
- Distinguir entre quimisorción y fisorción.
- Definir y clasificar las isoterma de adsorción.
- Deducir la isoterma de Langmuir y determinar los parámetros característicos.
- Explicar la influencia de la temperatura en la adsorción.
- Calcular la variación de la fracción de recubrimiento con la presión al variar la temperatura.
- Determinar e interpretar los parámetros característicos de la isoterma BET.
- Interpretar curvas electrocapilares.
- Determinar la variación de la tensión superficial, de la densidad de carga superficial y de la capacidad con el potencial aplicado.

#### **Tema 5**

- Explicar el mecanismo general de la catálisis heterogénea
- Aplicar los conocimientos de Cinética Formal a la deducción de la ley cinética de algunos procesos con catálisis heterogénea: Mecanismos de Langmuir-Hishelwood y de Rideal-Eley.
- Explicar de manera general el uso de catalizadores sólidos.
- Enumerar las diferencias entre procesos electródicos (faradaicos y no faradaicos).
- Deducir la función intensidad-corriente para algunos procesos: Transferencia de electrones y procesos reversibles controlados por difusión.
- Dar una visión eléctrica de los procesos electródicos.

#### **Tema 6**

- Definir polímero o macromolécula.
- Determinar los promedios de masas moleculares característicos de sistemas macromoleculares.
- Definir el tamaño de un polímero.
- Definir las temperaturas características de un polímero.



- 
- Explicar la variación del estado de un polímero en función de la temperatura.
  - Explicar los aspectos termodinámicos de un polímero en un disolvente. Determinar la variación de energía libre de mezcla.
  - Definir los sistemas coloidales.
  - Clasificar los sistemas coloidales.
  - Determinar la estructura y la estabilidad de sistemas coloidales.
  - Explicar los aspectos cinéticos de sistemas coloidales.
  - Explicar los aspectos termodinámicos de sistemas coloidales.
  - Citar aplicaciones prácticas de sistemas coloidales.

Y finalmente,

- Demostrar una conducta ética y responsable en el ejercicio de su trabajo profesional, valores que son transmitidos por los docentes e investigadores de la Universidad, como generadora y transmisora del conocimiento científico.



## DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS

### 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. Probabilidad de ocupación de niveles energéticos. Aplicación a la resonancia magnética de espín.
  - 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.

### 2. Cinética Molecular

1. Introducción
2. Teoría de Colisiones
  - 2.1. Velocidades Moleculares
    - 2.1.1. Funciones de distribución de la velocidad
    - 2.1.2. Obtención de las funciones de distribución de la velocidad
    - 2.1.3. Velocidades Características
  - 2.2. Distribución de Energías
  - 2.3. Colisiones con las Paredes. Efusión
  - 2.4. Colisiones Intermoleculares y recorrido libre medio
  - 2.5. Colisiones y Reactividad Química
3. Superficies de Energía Potencial
4. Teoría del Estado de Transición
  - 4.1. Hipótesis básicas y desarrollo
  - 4.2. Formulación termodinámica de la TET
  - 4.3. Limitaciones de la TET



### 3. Fenómenos de Transporte y Conductividad Electrolítica

- 1.- Introducción
  - 1.1.- Descripción macroscópica de estados de no equilibrio.
  - 1.2.- Definición de conceptos básicos.
  - 1.3.- Leyes fenomenológicas.
- 2.- Tipos de procesos de transporte y propiedades transportadas.
  - 2.1.- Conducción térmica . Ley de Fourier.
  - 2.2.- Viscosidad. Ley de Newton. Ley de Poiseuille.
  - 2.3.- Difusión. Primera ley de Fick.
  - 2.4.- Conducción iónica: Conductividad eléctrica,  $\kappa$ ; Ley de Ohm. Migración.
- 3.- Punto de vista microscópico. Fenómenos de transporte en gas de esferas rígidas.
  - 3.1.- Coeficiente de conductividad térmico.
  - 3.2.- Coeficiente de viscosidad.
  - 3.3.- Coeficiente de difusión, D.
- 4.- Ecuación general de la difusión.
  - 4.1.- Segunda ley de Fick.
  - 4.2.- Soluciones de la ecuación de difusión.
  - 4.3.- Difusión con convección. Ecuación general de la difusión
  - 4.4.- Conductividad molar. Ley de Kohlrausch. Movilidad iónica. Ecuación de Einstein. Relaciones de Nernst-Einstein.



#### 4. Fenómenos de Superficie

1. Interfase líquida
  - 1.1.- Tensión superficial
  - 1.2.- Interfases curvas
    - 1.2.1.- Ecuación de Young-Laplace
    - 1.2.2.- Presión de vapor en superficies curvas
  - 1.2.3.- Capilaridad
- 1.3.- Sistemas multicomponentes
- 2.- Interfase sólida
  - 2.1.- Fisisorción y quimisorción
  - 2.2.- Isotermas de adsorción
    - 2.2.1.- Isoterma de Langmuir
    - 2.2.2.- Extensiones de la Isoterma de Langmuir
    - 2.2.3.- Efecto de la temperatura sobre el equilibrio de adsorción
  - 2.2.4. Limitaciones en la isoterma de Langmuir
  - 2.3.- Otras isotermas
- 3.- Interfases electrizadas
  - 3.1.-Estructura de la interfase electrizada

#### 5. Catálisis Heterogénea y Cinética Electrónica

1. Introducción
- 2.-Introducción a la Catálisis
  - 2.1- Principios básicos de la Catálisis
    - 2.1.1. Mecanismo general de la Catálisis
    - 2.1.2.- Mecanismos tipo de catálisis heterogénea
    - 2.1.3.- Ejemplos de catálisis
1. Introducción a la Cinética Electrónica
- 3.1.La transferencia de electrones
- 3.2.Reacción electroquímica reversible controlada por difusión
- 3.3.Reacción con equilibrio químico previo a la transferencia de electrones

#### 6. Introducción a los sistemas Macromoleculares y Coloidales.

1. Introducció als sistemes Macromoleculares.
  - 1.1. Introducció.
  - 1.2. Distribució de pesos moleculars.
  - 1.3. Propietats físiques dels polímers.
  - 1.4. Termodinàmica de polímers en dissolució.
2. Introducció als sistemes col·loïdals.
  - 2.1. Classificació i preparació.
  - 2.2. Estructura i estabilitat: aspectes termodinàmics i cinètics.
  - 2.3. Aplicacions.



## VOLUMEN DE TRABAJO

ACTIVIDAD	Horas	% Presencial
Clases de teoría	51.00	100
Tutorías regladas	9.00	100
Elaboración de trabajos en grupo	7.00	0
Elaboración de trabajos individuales	7.00	0
Estudio y trabajo autónomo	41.00	0
Preparación de clases de teoría	14.00	0
Preparación de clases prácticas y de problemas	14.00	0
Resolución de cuestionarios on-line	7.00	0
<b>TOTAL</b>	<b>150.00</b>	

## METODOLOGÍA DOCENTE

El desarrollo de la asignatura se estructura en torno a tres ejes principales: las sesiones de teorías, las tutorías y lo seminarios.

En las clases de teoría se explicarán los conceptos fundamentales para cada uno de los temas recogidos en el temario, indicando las fuentes bibliográficas necesarias para la profundización del alumno. Además, los alumnos dispondrán de apuntes realizados por el equipo de profesores que pueden servir como *punto de partida* para el trabajo del alumno, *nunca como material único* de estudio. Tras exponer los conceptos teóricos se realizarán problemas correspondientes al tema.

Por lo que respecta a las sesiones de tutoría, además de las dudas presentadas por los alumnos, se trabajará sobre cuestiones y problemas propuestas por el profesor con suficiente antelación como para que el alumno pueda intentar resolverlas por sus medios y participar de una forma activa.

Además, está prevista la realización de seminarios para la ampliación y profundización en algunos de los aspectos de los temas destacados por su interés o actualidad. Los Seminarios-Conferencias versarán sobre aspectos complementarios de su formación en Química Física. Para esta tarea, los estudiantes asistirán al acto y contestarán a un cuestionario preparado por el profesor.

## EVALUACIÓN

La evaluación de la asignatura se realizará mediante dos vías, una presencial y otra no presencial. En principio todos los estudiantes están asignados a la vía presencial. Podrán solicitar el cambio a la no presencial mediante escrito dirigido al profesor en un término no superior a las 3 semanas desde el principio del curso. En la vía no presencial la nota final corresponde a la del examen.



La evaluación presencial de la asignatura se realizará a través de un examen final y actividades de evaluación continua. El examen será el 70% de la nota final y consistirá en una serie de cuestiones teóricas y prácticas (problemas) divididas en varios apartados. El 30% de la calificación provendrá de actividades de evaluación continua (entregables o exámenes parciales) y presenciales (participación en tutorías y seminarios). Para aprobar la asignatura deberá obtenerse una nota total igual o superior a 5. Además, será necesario que en cada uno de los apartados considerados en la evaluación total se alcance una nota mínima del 40% del total del apartado correspondiente.

La evaluación del aprendizaje de los estudiantes tendrá en cuenta todos los aspectos expuestos en el apartado de metodología de esta guía docente. La asistencia y contestación del cuestionario relativo al Seminario-Conferencia tendrá una equivalencia de una tutoría.

## REFERENCIAS

### Básicas

- LEVINE, I. N., Físicoquímica. 5ª edición. McGraw Hill, 2004. ISBN 9788448137861 (v. 1) ISBN 9788448137878 (v. 2)
- ATKINS, P., DE PAULA, J. Química Física. 8ª edición. Editorial Médica Panamericana, 2008. ISBN 9789500612487
- ENGEL, T., REID, P. Química Física. Pearson Addison Wesley 2006. ISBN 9788478290772

### Complementarias

- McQUARRIE, D.A., SIMONS, J.D., Physical Chemistry. A Molecular Approach. University Science Books, Sausalito. ISBN 9780935702996
- TUÑÓN, I., SILLA, E., Termodinámica Estadística para Químicos y Bioquímicos, Síntesis, 2008. ISBN 9788497566899