

**FITXA IDENTIFICATIVA****DADES DE L'ASSIGNATURA**

Codi: 34195
Nom: Química física III
Cicle: Grau
Crèdits ECTS: 6
Curs acadèmic: 2026-27

TITULACIONS

Titulació	Centre	Curs	Període
1110 - Grau de Química	Facultat de Química	3	Segon quadrimestre
1934 - Doble Grau en Química i Enginyeria Química	Facultat de Química	3	Segon quadrimestre

MATÈRIES

Titulació	Matèria	Caràcter
1110 - Grau de Química	Química Física	OBLIGATÒRIA
1934 - Doble Grau en Química i Enginyeria Química	Tercer curs	OBLIGATÒRIA

COORDINACIÓ

GRACIA EDO LOURDES

RESUM

L'assignatura Química Física III és una assignatura obligatòria que s'imparteix en el sisè semestre. En el pla d'estudis actualment en vigor consta d'un total de 6.0 crèdits ECTS.

Amb aquesta assignatura es pretén, essencialment, que l'alumne complete i integre la seua formació químicofísica. En les assignatures de Química Física I i II l'alumne ha adquirit coneixements de les visions macroscòpiques (fonamentalment termodinàmica) i microscòpiques (quàntica) de la matèria. En aquesta assignatura es pretén iniciar l'alumne en el caràcter complementari de les dues visions, mostrant com la Termodinàmica Estadística permet el càlcul de les propietats macroscòpiques de la matèria a partir de les propietats microscòpiques dels seus constituents. A més d'aquest propòsit fonamental, es pretén formar l'alumne en altres coneixements químicofísics encara no adquirits, com ara els fenòmens de superfícies i els polímers.

nòmens de superfícies i els polímers.

CONEIXEMENTS PREVIS

**RELACIÓ AMB ALTRES ASSIGNATURES DE LA MATEIXA TITULACIÓ****1110 - Grau de Química**

Obligació d'haver superat prèviament l'assignatura	34183 - Química general I 34184 - Química general II
Obligació de cursar simultàniament l'assignatura	36451 - Química Física II

1934 - Doble Grau en Química i Enginyeria Química

Obligació d'haver superat prèviament l'assignatura	34183 - Química general I 34184 - Química general II
Obligació de cursar simultàniament l'assignatura	36451 - Química Física II

ALTRES TIPUS DE REQUISITS

Per tal que es puga abordar amb èxit l'assignatura, és necessari que l'estudiant haja adquirit una sèrie de coneixements previs. Aquests coneixements són:

Maneig de conceptes termodinàmics (energia interna, entropia i energia lliure, espontaneïtat i equilibri) i de cinètica bàsica (mecanisme, etapa lenta, ordre de reacció, equacions integrades).

Maneig de conceptes quàntics, com ara la funció d'ona, estats i nivells. Coneixement de les solucions de sistemes model (partícula en la caps, rotor rígid...)

COMPETÈNCIES / RESULTATS D' APRENENTATGE**1110 - Grau de Química**

Actuar amb autonomia en l'aprenentatge, prenent decisions fonamentades en diversos contextos, emetent judicis sobre la base de l'experimentació i l'anàlisi i transferint el coneixement a noves situacions.

Al final de la matèria, l'estudiantat ha d'interpretar la relació de la variació de les propietats característiques dels elements químics amb la taula periòdica.

Al final de la matèria, l'estudiantat ha d'utilitzar correctament la terminologia química, nomenclatura, convenis i unitats.

Al final de la matèria, l'estudiantat ha de relacionar teoria i experimentació.

Al final de la matèria, l'estudiant ha d'abordar nous problemes i plantejar estratègies per a solucionar-los.

Al final de la matèria, l'estudiant ha d'enumerar els principis de la mecànica quàntica i aplicar-los a la descripció de l'estructura i propietats d'àtoms i molècules.

Al final de la matèria, l'estudiant ha d'enunciar els principis de termodinàmica i cinètica i les aplicacions d'aquestes en química.

Al final de la matèria, l'estudiant ha d'identificar els processos químics en la vida diària.

Al final de la matèria, l'estudiant ha d'identificar els tipus principals de reaccions químiques i les principals característiques associades a aquestes.

Al final de la matèria, l'estudiant ha de demostrar capacitat d'anàlisi, síntesi i raonament crític.



Al final de la matèria, l'estudiant ha de demostrar capacitat inductiva i deductiva.

Al final de la matèria, l'estudiant ha de distingir els aspectes qualitius i quantitius dels problemes químics.

Al final de la matèria, l'estudiant ha de poder descriure les característiques i comportament dels diversos estats de la matèria i les teories utilitzades per a explicar-los.

Al final de la matèria, l'estudiant ha de poder implementar metodologies sostenibles i respectuoses amb el medi ambient.

Al final de la matèria, l'estudiant ha de relacionar la química amb altres disciplines.

Al final de la matèria, l'estudiant ha de resoldre problemes de manera efectiva.

Col·laborar eficaçment en equips de treball, assumint responsabilitats i funcions de lideratge i contribuint a la millora i desenvolupament col·lectiu.

Conèixer i comprendre, des de l'àmbit de la titulació, les desigualtats per raó de sexe i gènere en la societat; integrar les diverses necessitats i preferències per raó de sexe i de gènere en el disseny de solucions i resolució de problemes.

Contribuir en el disseny, desenvolupament i execució de solucions que donen resposta a demandes socials, tenint en compte com a referent els objectius de desenvolupament sostenible.

Demostrar raonament crític i autocrític en l'àmbit de la titulació, considerant aspectes com ara l'ètica professional, els valors morals i les implicacions socials de les diverses activitats realitzades.

Expressar-se correctament, tant de forma oral com escrita, en qualsevol de les llengües oficials de la Comunitat Valenciana.

Proposar solucions creatives i innovadores a situacions o problemes complexos, propis de l'àmbit de coneixement, per a donar resposta a les diverses necessitats professionals i socials.

Saber comunicar-se de manera efectiva, tant de manera oral com escrita, adaptant-se a les característiques de la situació i de l'audiència.

DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

1. Termodinàmica estadística: fonaments i sistemes de partícules independents

1. - Introducció a la termodinàmica estadística

1.1. Origen de la termodinàmica estadística.

1.2. Estats d'un sistema. Relació entre les propietats macroscòpiques i microscòpiques d'un sistema.

2. - Com es calculen les propietats termodinàmiques? El concepte de col·lectiu

2.1. Probabilitat d'un microestat en el col·lectiu canònic. Probabilitat d'ocupació de nivells energètics.



Aplicació a la ressonància magnètica d'espín

2.2. Funcions termodinàmiques en el col·lectiu canònic.

2.3. Propietats i interpretació de la funció de partició canònica. 3. -Funció de partició en sistemes de partícules no interactuants.

4. - Funció de partició molecular.

5. - Propietats termodinàmiques del gas ideal.

6. - La constant d'equilibri entre gasos ideals.

2. Cinètica molecular

1. Introducció.

2. Teoria de col·lisions.

2.1. Velocitats moleculars.

2.1.1. Funcions de distribució de la velocitat.

2.1.2. Obtenció de les funcions de distribució de la velocitat.

2.1.3. Velocitats característiques.

2.2. Distribució d'energies.

2.3. Col·lisions amb les parets. Efusió.

2.4. Col·lisions intermoleculars i recorregut lliure mitjà.

2.5. Col·lisions i reactivitat química.

3. Superfícies d'energia potencial.

4. Teoria de l'estat de transició.

4.1. Hipòtesis bàsiques i desenvolupament.

4.2. Formulació termodinàmica de la TET.

4.3. Limitacions de la TET.

3. Fenòmens de transport i conductivitat electrolítica

1. Introducció.

1.1. - Descripció macroscòpica d'estats de no equilibri.

1.2. - Definició de conceptes bàsics.

1.3. - Lleis fenomenològiques.

2. Tipus de processos de transport i propietats transportades.

2.1. - Conducció tèrmica. Llei de Fourier.

2.2. - Viscositat. Llei de Newton. Llei de Poiseuille.

2.3. - Difusió. Primera llei de Fick.

2.4. - Conducció iònica: conductivitat elèctrica, χ . Llei d'Ohm. Migració.

3. - Punt de vista microscòpic. Fenòmens de transport en gas d'esferes rígides.

3.1.- Coeficient de conductivitat tèrmic

3.1. - Coeficient de viscositat,

3.2. - Coeficient de difusió, D .

4. - Equació general de la difusió.



- 4.1. - Segona llei de Fick.
- 4.2. - Solucions de l'equació de difusió.
- 4.3. - Difusió amb convecció. Equació general de la difusió.
- 4.4. - Conductivitat molar. Llei de Kohlrausch. Mobilitat iònica. Equació d'Einstein. Relacions de Nernst-Einstein

4. Fenòmens de superfície

- 1.- Interfase líquida.
 - 1.1.- Tensió superficial.
 - 1.2.- Interfases corbes.
 - 1.2.1.- Equació de Young-Laplace.
 - 1.2.2.- Pressió de vapor en superfícies corbes.
 - 1.2.3.- Capil·laritat.
 - 1.3. - Sistemes multicomponents.
- 2.- Interfase sòlida.
 - 2.1.- Fisisorció i quimisorció.
 - 2.2. - Isotermes d'adsorció.
 - 2.2.1.- Isoterma de Langmuir.
 - 2.2.1.1.- Extensions de la isoterma de Langmuir.
 - 2.2.1.2.- Efecte de la temperatura sobre l'equilibri d'adsorció.
 - 2.2.1.3.- Limitacions en la isoterma de Langmuir.
 - 2.2.2. - Altres isotermes.
 - 3. - Interfases electritzades.
 - 3.1.-Estructura de la interfase electritzada.

5. Catàlisi heterogènia i cinètica electròdica

- 1.Introducció.
- 2.-Introducció a la catàlisi.
 - 2.1-Principis bàsics de la catàlisi.
 - 2.1.1. Mecanisme general de la catàlisi.
 - 2.1.2.- Mecanismes tipus de catàlisi heterogènia.
 - 2.1.3.- Exemples de catàlisi.
- 3.Introducció a la cinètica electròdica.
 - 3.1. La transferència d'electrons.
 - 3.2. Reacció electroquímica reversible controlada per difusió.
 - 3.3. Reacció amb equilibri químic previ a la transferència d'electrons.



6. Introducció als sistemes macromoleculars i col·loïdals

1. Introducció als sistemes macromoleculars.
 - 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.

VOLUM DE TREBALL (HORES)

ACTIVITATS PRESENCIALS

Activitat	Hores
Tutories	9,00
Teoria	51,00
Total hores	60,00

ACTIVITATS NO PRESENCIALS

Activitat	Hores
Assistència a altres activitats	0,00
Elaboració de treballs individuals o en grup	14,00
Estudi i treball autònom	41,00
Preparació de classes	28,00
Preparació d'activitats d'avaluació	7,00
Resolució de casos pràctics	0,00
Total hores	90,00

METODOLOGIA DOCENT

El desenvolupament de l'assignatura s'estructura al voltant de tres eixos principals: les sessions de teories, les tutories i el seminaris.

A les classes de teoria s'explicaran els conceptes fonamentals per a cada un dels temes recollits en el temari, tot i indicant les fonts bibliogràfiques necessàries per a l'aprofundiment de l'alumne. A més, els alumnes disposaran d'apunts realitzats per l'equip de professors que es poden fer servir com a punt de partida per al treball de l'alumne, mai com a material únic d'estudi. Una vegada exposats els conceptes teòrics es realitzaran problemes corresponents al tema.



Pel que fa a les sessions de tutoria, a més dels dubtes presentades pels alumnes, es treballarà sobre qüestions proposades pel professor amb suficient antelació com per a que l'alumne pugui intentar resoldre pels seus mitjans i participar d'una forma activa.

A més, està prevista la realització de seminaris per a l'ampliació i aprofundiment en alguns dels aspectes dels temes destacats pel seu interès o actualitat. Els seminaris-conferències versaran sobre aspectes complementaris de la seua formació en Química Física. Per a aquesta tasca, els estudiants assistiran a l'acte i contestaran un qüestionari preparat pel professor.

ionari preparat pel professor.

AVALUACIÓ

Primera Convocatòria

L'avaluació de l'assignatura es realitzarà mitjançant la realització d'un examen final (amb possibilitat de fer-lo de forma oral) i a les activitats d'avaluació contínua. Hi haurà dues modalitats, A i B. En la modalitat A, l'examen serà el 70% de la nota final i consistirà en una sèrie de qüestions teòriques i pràctiques (problemes) dividides en diversos apartats. El 30% de la qualificació provindrà d'activitats d'avaluació contínua (lliurables o qüestionaris o proves escrites) i presencials (participació en tutories i seminaris). En la modalitat B, l'examen serà el 90% de la nota final i el 10% de la qualificació provindrà d'activitats d'avaluació contínua (lliurables o qüestionaris).

La modalitat per defecte serà l'A. Accedir a la modalitat B requerirà una justificació sobre la no possibilitat d'acudir a les activitats presencials i l'aprovació per part del professor que impartisca l'assignatura.

Per aprovar l'assignatura s'haurà d'obtenir una nota total igual o superior a 5. A més serà necessari que en cada un dels apartats considerats en l'avaluació total s'assolesca una nota mínima del 45% del total de l'apartat corresponent. L'avaluació de l'aprenentatge dels estudiants tindrà en compte tots els aspectes exposats en l'apartat de Metodologia d'aquesta guia docent. L'assistència al Seminari-Conferència i l'emplenament del qüestionari corresponent tindran una equivalència d'una tutoria.

-

Segona Convocatòria

Només es podrà recuperar la part corresponent a l'examen final (mai l'avaluació contínua). Es mantindran els mateixos percentatges definits per a la primera convocatòria.

Advertiment final

La còpia o plagi manifest de qualsevol tasca que forma part de l'avaluació suposarà la impossibilitat de



superar l'assignatura, sotmetent-se seguidament als procediments disciplinaris oportuns.

Tinga's en compte que, d'acord amb l'article 13 d) de l'Estatut de l'Estudiant Universitari (RD 1791/2010, de 30 de desembre), *"és deure d'un estudiant abstinre's en la utilització o cooperació en procediments fraudulents en les proves d'avaluació, en els treballs que es realitzen o en documents oficials de la Universitat"*.

BIBLIOGRAFIA

- 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
- 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