

**FICHA IDENTIFICATIVA****DATOS DE LA ASIGNATURA****Código:** 36596**Nombre:** Elementos de Química Física**Ciclo:** Grado**Créditos ECTS:** 7,5**Curso académico:** 2026-27**TITULACIONES**

Titulación	Centro	Curso	Periodo
1929 - Doble Grado en Física y Química	Facultat de Física	4	Segundo cuatrimestre

**MATERIAS**

Titulación	Materia	Carácter
1929 - Doble Grado en Física y Química	Cuarto Curso (Obligatorio)	OBLIGATORIA

**COORDINACIÓN**

RUIZ PERNIA JOSE JAVIER

ROCA SANJUAN DANIEL

**RESUMEN**

El plan de estudios del Doble Grado de Física y Química contiene solo una asignatura obligatoria en la que se abordan los contenidos teóricos de la Química Física: "Elementos de Química Física", ubicada en el octavo cuatrimestre. Es un módulo específico de esta doble titulación, en el que se estudian aquellos contenidos, tanto macroscópicos como microscópicos, de las tres asignaturas del Grado en Química que corresponden a esta especialidad (Química Física I, II y III) y que no aparecen recogidos en materias como Termodinámica, Física Cuántica I y II, Física Estadística, etc. Así, los dos bloques de contenido más importantes son la espectroscopia y la cinética química, a los cuales se han agregado temas concretos relacionados con termodinámica química, termoestadística y electroquímica. Los resultados de aprendizaje que se adquieren en este módulo se complementarán posteriormente, en quinto curso, con los de la asignatura práctica "Laboratorio de Química Física".

ica "Laboratorio de Química Física".

**CONOCIMIENTOS PREVIOS****RELACIÓN CON OTRAS ASIGNATURAS DE LA MISMA TITULACIÓN**

No se han especificado restricciones de matrícula con otras asignaturas del plan de estudios.



## OTROS TIPOS DE REQUISITOS

Requisitos R4-OBLIGACIÓN DE HABER SUPERADO PREVIAMENTE LA ASIGNATURA34183 - Química General I34184 - Química General II34233 Física General I34234 Física General II34235 Física General III34236 - OBLIGACIÓN DE CURSAR SIMULTÁNEAMENTE LA ASIGNATURA34246 Física Estadística

## COMPETENCIAS / RESULTADOS DE APRENDIZAJE

### 1929 - Doble Grado en Física y Química

Comprender los aspectos cualitativos y cuantitativos de los problemas químicos.

Demostrar capacidad inductiva y deductiva.

Demostrar el conocimiento y comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionadas con las áreas de la Química.

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.

Demostrar que conoce las características y comportamiento de los diferentes estados de la materia y las teorías empleadas para describirlos.

Demostrar que conoce los principios de la Mecánica Cuántica y su aplicación a la descripción de la estructura y propiedades de átomos y moléculas.

Demostrar que conoce los principios de termodinámica y cinética y sus aplicaciones en Química.

Desarrollar capacidad de análisis, síntesis y razonamiento crítico.

Evaluar, interpretar y sintetizar los datos e información Química.

Interpretar los datos procedentes de observaciones y medidas en el laboratorio en términos de su significación y de las teorías que la sustentan.

Poseer habilidades básicas en tecnologías de la información y comunicación y gestionar adecuadamente la información obtenida.

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.

Reconocer y analizar nuevos problemas y planear estrategias para solucionarlos.

Reconocer y valorar los procesos químicos en la vida diaria.

Relacionar las propiedades macroscópicas y propiedades de átomos y moléculas individuales, incluyendo macromoléculas (naturales y sintéticas), polímeros, coloides y otros materiales.

Relacionar teoría y experimentación.



Resolver problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados.

Resolver problemas de forma efectiva.

## DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS

### 1. Estructura molecular

Moléculas polielectrónicas: planteamiento general. Aproximación de Born-Oppenheimer. La molécula ion de hidrógeno (método OM-CLOA). La molécula de hidrógeno. Moléculas diatómicas (homonucleares y heteronucleares). Moléculas poliatómicas. Sistemas pi-electrónicos. Método de Hückel

### 2. Fundamentos de espectroscopia

Espectroscopia: tipos de espectros. Interacción radiación-materia: aproximación semiclásica. Ley de distribución de Boltzmann. La señal espectroscópica: posición, intensidad y anchura. Ley de Lambert-Beer. Emisión láser.

### 3. Espectroscopias de rotación y vibración

Espectroscopias de movimiento nuclear colectivo. Niveles de energía rotacional de moléculas diatómicas y lineales. Espectros de rotación pura. Espectroscopia de microondas: aplicaciones. Niveles de energía vibracional. Espectros de vibración de moléculas diatómicas. Espectros de rotación-vibración. Espectros de vibración de moléculas poliatómicas: modos normales de vibración. Espectroscopia IR: aplicaciones. Espectroscopia Raman.

### 4. Espectroscopia electrónica e introducción a la fotoquímica

Interpretación cuántica de los espectros electrónicos. Tipos de espectroscopia electrónica. Espectros atómicos. Espectros moleculares de absorción (diatómicas). Estructura vibracional: principio de Franck-Condon. Cromóforos. Espectros moleculares de emisión: fluorescencia y fosforescencia. Procesos fotofísicos y fotoquímicos.

Introducción. Condición termodinámica de equilibrio químico. Equilibrio químico en una mezcla de gases ideales. Constantes de equilibrio. Equilibrio químico en gases reales. Equilibrio químico en disoluciones ideales no electrolíticas. Equilibrio químico en disoluciones reales no electrolíticas. Equilibrio químico en disoluciones de electrolitos. Potencial de electrodo. Propiedades del potencial electroquímico. Termodinámica de una pila. Medida de magnitudes termodinámicas a partir de la diferencia de potencial entre los electrodos de una pila. Potencial de unión líquida. Aplicaciones de la medida de la fuerza



## 5. Equilibrio químico y electroquímico

electromotriz: coeficiente de actividad, pK, producto de solubilidad, y predicción de la espontaneidad de reacciones redox y de la corrosión metálica.

## 6. Termodinámica estadística

Introducción. Función de partición en sistemas de partículas no interactuantes. Función de partición molecular. Propiedades termodinámicas del gas ideal. La constante de equilibrio entre gases ideales.

## 7. Cinética formal

Introducción. Reacciones complejas: reacciones reversibles, reacciones competitivas, reacciones consecutivas. Mecanismos de reacción. Aproximación de la etapa limitante. Aproximación del estado estacionario. Variación de la constante de velocidad con la temperatura. Catálisis.

## 8. Cinética molecular

Introducción. Superficies de energía potencial. Teoría del estado de transición (TET): Hipótesis básicas y desarrollo. Formulación termodinámica de la TET. Limitaciones de la TET.

## 9. Interfases sólidas y electrizadas

Interfase sólida. Fisisorción y quimisorción. Isotermas de adsorción. Isotherma de Langmuir. Isotherma de Brunauer, Emmet y Teller (BET). Otras isotermas. Interfase electrizada. Estructura de la interfase electrizada. Modelos de Helmholtz-Perrin, Gouy-Chapman y Stern.

## 10. Catálisis heterogénea y cinética electródica

Introducción. Mecanismo general de la catálisis. Características y etapas de la catálisis heterogénea. Ejemplos y aplicaciones. Mecanismo general de la cinética electródica. Ley de velocidad de la transferencia electrónica. Relación entre corriente y velocidad de reacción: ecuación de Butler-Volmer. Formas aproximadas de dicha relación.

## 11. Macromoléculas

Introducción a los sistemas macromoleculares. Clasificación y tipos de polímeros. Distribución de masas moleculares. Propiedades físicas de los polímeros. Termodinámica de polímeros en disolución.

**VOLUMEN DE TRABAJO (HORAS)****ACTIVIDADES PRESENCIALES**

Actividad	Horas
Tutorías	11,00
Teoría	64,00
<b>Total horas</b>	<b>75,00</b>

**ACTIVIDADES NO PRESENCIALES**

Actividad	Horas
Asistencia a otras actividades	0,00
Elaboración de trabajos individuales o en grupo	20,00
Estudio y trabajo autónomo	50,00
Preparación de clases	35,00
Preparación de actividades de evaluación	7,00
Resolución de casos prácticos	0,00
<b>Total horas</b>	<b>112,00</b>

**METODOLOGÍA DOCENTE**

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

participar de una forma activa.

**EVALUACIÓN*****Primera Convocatoria***

La evaluación de la asignatura se realizará a través de un examen final (con posibilidad de hacerlo de forma oral) y actividades de evaluación continua. Habrá dos modalidades, A y B. En la modalidad A, 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 cuestionarios o pruebas escritas) y presenciales (participación en tutorías y seminarios). En la modalidad B, el examen será el 90% de la nota final y el 10% de la calificación



provendrá de actividades de evaluación continua (entregables o cuestionarios).

La modalidad por defecto será la A. Acceder a la modalidad B requerirá una justificación sobre la no posibilidad de acudir a las actividades presenciales y la aprobación por parte del profesor que imparta la asignatura.

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 45% 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.

### **Segunda Convocatoria**

Sólo se podrá recuperar la parte correspondiente al examen final (nunca la evaluación continua). Se mantendrán los mismos porcentajes definidos para la primera convocatoria.

### **Advertencia final**

La copia o plagio manifiesto de cualquier tarea que forma parte de la evaluación supondrá la imposibilidad de superar la asignatura, sometiéndose seguidamente a los procedimientos disciplinarios oportunos.

Téngase en cuenta que, de acuerdo con el artículo 13 d) del Estatuto del Estudiante Universitario (RD 1791/2010, de 30 de diciembre), *"es deber de un estudiante abstenerse en la utilización o cooperación en procedimientos fraudulentos en las pruebas de evaluación, en los trabajos que se realicen o en documentos oficiales de la Universidad"*.

en los trabajos que se realicen o en documentos oficiales de la Universidad".

## **BIBLIOGRAFÍA**

- 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.
- HOLLAS, J. M., Modern Spectroscopy, 2<sup>a</sup> ed., John Wiley & Sons, 1992.
- LEVINE, I.N., Química Cuántica, 5<sup>a</sup> ed., Prentice Hall, 2001.
- REQUENA, A. y ZUÑIGA, J., Espectroscopia, Pearson Prentice Hall, 2003.