

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

**Codi:** 36596  
**Nom:** Elements de Química Física  
**Cicle:** Grau  
**Crèdits ECTS:** 7,5  
**Curs acadèmic:** 2025-26

**TITULACIONS**

Titulació	Centre	Curs	Període
1929 - Doble Grau en Física i Química	Facultat de Física	4	Segon quadrimestre

**MATÈRIES**

Titulació	Matèria	Caràcter
1929 - Doble Grau en Física i Química	Quart Curs (Obligatori)	OBLIGATÒRIA

**COORDINACIÓ**

RUIZ PERNIA JOSE JAVIER

ROCA SANJUAN DANIEL

**RESUM**

El pla d'estudis del Doble Grau de Física i Química conté només una assignatura obligatòria en la qual s'aborden els continguts teòrics de la Química Física: "Elements de Química Física", situada en el huité quadrimestre. És un mòdul específic d'aquesta doble titulació, en el qual s'estudien aquells continguts, tant macroscòpics com microscòpics, de les tres assignatures del Grau en Química que corresponen a aquesta especialitat (Química Física I, II i III) i que no apareixen recollits en matèries com a Termodinàmica, Física Quàntica I i II, Física Estadística, etc. Així, els dos blocs de contingut més importants són l'espectroscòpia i la cinètica química, als quals s'han agregat temes concrets relacionats amb termodinàmica química, termoestadística i electroquímica. Els resultats d'aprenentatge que s'adquireixen en aquest mòdul es complementaran posteriorment, en cinqué curs, amb els de l'assignatura pràctica "Laboratori de Química Física".

**CONEIXEMENTS PREVIS****RELACIÓ AMB ALTRES ASSIGNATURES DE LA MATEIXA TITULACIÓ**

No s'ha especificat restriccions de matrícula amb altres assignatures del pla d'estudis.



## ALTRES TIPUS DE REQUISITS

Requisits R4-OBLIGACIÓ D'HAYER SUPERAT PRÈVIAMENT L'ASSIGNATURA34183 - Química General I34184 - Química General II34233 Física General I34234 Física General II34235 Física General III R5-OBLIGACIÓ DE CURSAR SIMULTÀNIAMENT L'ASSIGNATURA34246 Física Estadística

## COMPETÈNCIES / RESULTATS D' APRENTATGE

-

Avaluar, interpretar i sintetitzar les dades i la informació Química.

Comprendre els aspectes qualitius i quantitius dels problemes químics.

Demostrar capacitat inductiva i deductiva.

Demostrar el coneixement i la comprensió dels fets essencials, dels conceptes, dels principis i de les teories relacionades amb les àrees de la química.

Demostrar habilitat per a transmetre informació, idees, problemes i solucions tant a un públic especialitzat com no especialitzat i utilitzant si escau les tecnologies de la informació.

Demostrar que coneix els principis de la mecànica quàntica i l'aplicació a la descripció de l'estructura i de les propietats d'àtoms i molècules.

Demostrar que coneix els principis de termodinàmica i cinètica i les seues aplicacions en química.

Demostrar que coneix les característiques i el comportament dels diferents estats de la matèria i les teories usades per descriure'ls.

Desenvolupar capacitat d'anàlisi, síntesi i raonament crític.

Interpretar les dades procedents d'observacions i mesures en el laboratori en termes de la seua significació i de les teories que la sustenten.

Posseir habilitats bàsiques en tecnologies de la informació i comunicació i gestionar adequadament la informació obtinguda.

Que els estudiants tinguen la capacitat d'arreglar i interpretar dades rellevants (normalment dins de la seua àrea d'estudi) per emetre judicis que incloguen una reflexió sobre temes rellevants d'índole social, científica o ètica.

Reconèixer i analitzar problemes nous i planejar estratègies per solucionar-los.

Reconèixer i valorar els processos químics en la vida diària.

Relacionar les propietats macroscòpiques i propietats d'àtoms i molècules individuals, incloent-hi macromolècules (naturals i sintètiques), polímers, col·loides i altres materials.

Relacionar teoria i experimentació.



Resoldre problemes de forma efectiva.

Resoldre problemes qualitius i quantitius segons models desenvolupats prèviament.

## DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

### 1. Estructura molecular

Molècules polieletròniques: plantejament general. Aproximació de Born-Oppenheimer. La molècula ió d'hidrogen (mètode OM-CLOA). La molècula d'hidrogen. Molècules diatòmiques (homonuclears i heteronuclears). Molècules poliatòmiques. Sistemes pi-electrònics. Mètode de Hückel.

### 2. Fonaments despectroscòpia

Espectroscòpia: tipus d'espectres. Interacció radiació-matèria: aproximació semiclàssica. Llei de distribució de Boltzmann. El senyal espectroscòpic: posició, intensitat i amplària. Llei de Lambert-Beer. Emissió làser.

### 3. Espectroscòpies de rotació i vibració

Espectroscòpies de moviment nuclear col·lectiu. Nivells d'energia rotacional de molècules diatòmiques i lineals. Espectres de rotació pura. Espectroscòpia de microones: aplicacions. Nivells d'energia vibracional. Espectres de vibració de molècules diatòmiques. Espectres de rotació-vibració. Espectres de vibració de molècules poliatòmiques: modes normals de vibració. Espectroscòpia IR: aplicacions. Espectroscòpia Raman.

### 4. Espectroscòpia electrònica i introducció a la fotoquímica

Interpretació quàntica dels espectres electrònics. Tipus d'espectroscòpia electrònica. Espectres atòmics. Espectres moleculars d'absorció (diatòmiques). Estructura vibracional: principi de Franck-Condon. Cromòfors. Espectres moleculars d'emissió: fluorescència i fosforescència. Processos fotofísics i fotoquímics.

### 5. Equilibri químic i electroquímic

Introducció. Condició termodinàmica d'equilibri químic. Equilibri químic en una mescla de gasos ideals. Constants d'equilibri. Equilibri químic en gasos reals. Equilibri químic en dissolucions ideals no electrolítiques. Equilibri químic en dissolucions reals no electrolítiques. Equilibri químic en dissolucions d'electròlits. Potencial d'elèctrode. Propietats del potencial electroquímic. Termodinàmica d'una pila. Mesura de magnituds termodinàmiques a partir de la diferència de potencial entre els elèctrodes d'una pila. Potencial d'unió líquida. Aplicacions de la mesura de la força electromotriu: coeficient d'activitat, pK, producte de solubilitat, i predicció de l'espontaneïtat de reaccions redox i de la corrosió metàl·lica.



## 6. Termodinàmica estadística

Introducció. Funció de partició en sistemes de partícules no interactuants. Funció de partició molecular. Propietats termodinàmiques del gas ideal. La constant d'equilibri entre gasos ideals.

## 7. Cinètica formal

Introducció. Reaccions complexes: reaccions reversibles, reaccions competitives, reaccions consecutives. Mecanismes de reacció. Aproximació de l'etapa limitant. Aproximació de l'estat estacionari. Variació de la constant de velocitat amb la temperatura. Catàlisi.

## 8. Cinètica molecular

Introducció. Superfícies d'energia potencial. Teoria de l'estat de transició (TET): Hipòtesis bàsiques i desenvolupament. Formulació termodinàmica de la TET. Limitacions de la TET.

## 9. Interfases sòlides i electritzades

Interfase sòlida. Fisorció i quimisorció. Isothermes d'adsorció. Isotherma de Langmuir. Isotherma de Brunauer, Emmet i Teller (BET). Altres isothermes. Interfase electritzada. Estructura de la interfase electritzada. Models de Helmholtz-Perrin, Gouy-Chapman i Stern.

## 10. Catàlisi heterogènia i cinètica electròdica

Introducció. Mecanisme general de la catàlisi. Característiques i etapes de la catàlisi heterogènia. Exemples i aplicacions. Mecanisme general de la cinètica electròdica. Llei de velocitat de la transferència electrònica. Relació entre corrent i velocitat de reacció: equació de Butler-Volmer. Formes aproximades d'aquesta relació.

## 11. Macromolècules

Introducció als sistemes macromoleculars. Classificació i tipus de polímers. Distribució de masses moleculars. Propietats físiques dels polímers. Termodinàmica de polímers en dissolució.

## VOLUM DE TREBALL (HORES)

### ACTIVITATS PRESENCIALS

Activitat	Hores
Tutories	11,00
Teoria	64,00



Total hores	75,00
-------------	-------

## ACTIVITATS NO PRESENCIALS

Activitat	Hores
Assistència a altres activitats	0,00
Elaboració de treballs individuals o en grup	20,00
Estudi i treball autònom	50,00
Preparació de classes	35,00
Preparació d'activitats d'avaluació	7,00
Resolució de casos pràctics	0,00
<b>Total hores</b>	<b>112,00</b>

## METODOLOGIA DOCENT

El desenvolupament de l'assignatura s'estructura entorn de tres eixos principals: les sessions de teoria, les tutories i els seminaris.

En les classes de teoria s'explicaran els conceptes fonamentals per a cadascun dels temes recollits en el temari, indicant les fonts bibliogràfiques necessàries per a l'aprofundiment de l'alumne. A més, els alumnes disposaran d'anotacions realitzades per l'equip de professors que poden servir com a punt de partida per al treball de l'alumne, mai com a material únic d'estudi. Després d'exposar els conceptes teòrics es realitzaran problemes corresponents al tema.

Pel que respecta a les sessions de tutoria, a més dels dubtes presentats pels alumnes, es treballarà sobre qüestions i problemes proposats pel professor amb suficient antelació com perquè l'alumne pugui intentar resoldre'ls pels seus mitjans i participar d'una forma activa.

## 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 dos 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 imparteixi 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 continua). 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.

Cal tindre 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 abstinde'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. 5ªedición. 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, 2ª ed., John Wiley & Sons, 1992.
- LEVINE, I.N., Química Cuántica, 5ª ed., Prentice Hall, 2001.



- REQUENA, A. y ZUÑIGA, J., Espectroscopia, Pearson Prentice Hall, 2003.