

GUÍA DOCENTE

Química Física Avanzada

Curso 2010/2011

Ignacio Tuñón

Departamento de Química Física

Universitat de València

DATOS INICIALES DE IDENTIFICACIÓN
--

Nombre de la asignatura:	Química Física Avanzada
Carácter:	Troncal
Titulación:	Ciencias Químicas
Ciclo:	Segundo Ciclo
Departamento:	Química Física
Profesores responsables:	Ignacio Tuñón García de Vicuña Despacho 5342 Edificio E, 3ª planta e-mail: tunon@uv.es Tlf: 96 354 4880

INTRODUCCIÓN A LA ASIGNATURA

La asignatura *Química Física Avanzada* es una asignatura troncal de carácter anual. En el plan de estudios actualmente en vigor consta de un total de 9.0 créditos.

Con esta asignatura se pretende, esencialmente, que el alumno complete su formación químico física. En las asignaturas de *Fundamentos de Química Física* y *Química Física* el alumno ha adquirido conocimientos de las visiones macroscópicas (fundamentalmente Termodinámica) y microscópicas (Cuántica) de la materia. En esta asignatura se pretende iniciar 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.

OBJETIVOS GENERALES

Los objetivos generales son:

- Se pretende que todos los alumnos conozcan los hechos, conceptos y principios físicos que permiten establecer la relación entre el mundo macroscópico (Termodinámica) y el microscópico (Mecánica).
- Completar la formación Químico Física estudiando los fenómenos de superficie (equilibrio y reactividad).
- Proporcionar una introducción al estudio de los polímeros y los sistemas coloidales.
- Lograr que el alumno adquiriera la terminología básica de la Química Física y que sepa utilizarla, expresando las ideas con la precisión requerida en el ámbito científico y siendo capaz de establecer relaciones entre los distintos conceptos y con otras áreas de conocimiento.
- Conseguir que el alumno sea capaz de buscar y seleccionar información en el ámbito de la Química Física cuando lo necesite.

CONTENIDOS

La asignatura se estructura en cuatro grandes bloques de conocimiento físico-químico:

- Termodinámica Estadística
- Fenómenos de Transporte y Cinética Molecular
- Fenómenos de Superficie
- Introducción a los Polímeros

Los contenidos concretos se resumen en:

- Principios básicos termodinámicos de la mecánica estadística
- Aplicación para el estudio de las propiedades termodinámicas de los sistemas ideales y reales.
- Comprensión microscópica de los fenómenos de no equilibrio: procesos de transporte y cinética molecular

- Introducción y manejo de distintas teorías microscópicas para explicar la reactividad química: teoría de colisiones y teoría del complejo activado.
- Introducción y manejo del concepto de superficie de energía potencial
- Estudio termodinámico de las interfases. Conceptos de tensión superficial y adsorción. Isotermas de Gibbs, Langmuir y BET
- Análisis mecanístico de la catálisis heterogénea: etapas y ejemplo de interés
- Estudio de las interfases electrizadas. Aplicación a los coloides
- Introducción a la ciencia de los polímeros. Conceptos básicos y termodinámica de sus disoluciones.

DESTREZAS A ADQUIRIR

- Cálculo de las funciones de partición moleculares y, a partir de ellas, de las propiedades termodinámicas de la materia en particular la energía libre y las constantes de equilibrio.
- Cálculo de propiedades termodinámicas de sistemas reales, tales como los coeficientes del virial en gases.
- Análisis estructural de líquidos a partir de sus funciones de distribución radial.
- Manejo de las funciones de distribución de velocidades con el objetivo de conocer las proporciones de moléculas que presentan unos determinados valores de la velocidad. Obtención de propiedades de transporte a partir de las velocidades medias.
- Cálculo de las constantes de velocidad de reacciones bimoleculares a partir de la teoría de colisiones y de la teoría del estado de transición.
- Uso de las isotermas para cuantificar la adsorción superficial de una sustancia tanto sobre líquidos (Gibbs) como sobre sólidos (Langmuir y BET).
- Racionalizar el comportamiento de las reacciones con catálisis heterogénea en función de las distintas etapas que la forman. Deducir el mecanismo que rige una determinada reacción a partir de observaciones experimentales
- Adquirir conceptos básicos sobre los polímeros y en particular sus disoluciones.
- Ser capaces de entender las ecuaciones matemáticas que gobiernan los fenómenos bajo estudio, así como manejarlas haciendo uso de los distintos sistemas de unidades.

TEMARIO Y PLANIFICACIÓN TEMPORAL

Bloque I. Termodinámica Estadística

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

- Introducción a la Termodinámica Estadística
- Estados de un Sistema. Relación entre las Propiedades Macroscópicas y Microscópicas de un Sistema.
- Funciones Termodinámicas en el Colectivo Canónico.
- Propiedades e interpretación de la Función de Partición Canónica.
- Función de Partición en Sistemas de Partículas no Interactuantes.
- Función de Partición Molecular.
- Propiedades Termodinámicas del Gas Ideal.

Tema 2. Termodinámica Estadística de Sistemas Reales

- Introducción. Fuerzas Intermoleculares
- Función de Partición Clásica
- Gases Reales
- Capacidad calorífica en Sólidos Cristalinos
- Líquidos. Función de distribución Radial

Tema 3. Teoría Cinética de Gases

- Introducción a la Teoría Cinética de Gases
- Función de Distribución de la Velocidad
- Velocidades Medias y más Probable
- Función de Distribución de la Energía
- Colisiones con las Paredes. Efusión
- Colisiones Intermoleculares

Bloque II. Fenómenos de Transporte y Cinética Molecular

Tema 4. Fenómenos de Transporte

- Introducción a los Fenómenos de Transporte: Conductividad térmica, Viscosidad y Difusión
- Conductividad Térmica: ley de Fourier.
- Viscosidad: leyes de Newton y Poiseuille
- Difusión: Primera ley de Fick
- Tratamiento microscópico de los fenómenos de transporte en gases ideales
- Difusión en líquidos.

Tema 5. Cinética Molecular

- Introducción
- Teoría de Colisiones
- Superficies de Energía Potencial y Dinámicas de Reacción
- Teoría del Estado de Transición
 - Desarrollo de la TET
 - Formulación Termodinámica
 - Efectos Cinéticos Isotópicos
 - Limitaciones de la TET

Bloque III. Fenómenos de Superficie

Tema 6. Estudio Termodinámico de la Interfase

- Región interfacial o interfase
- Tensión superficial
- Interfases curvas

Ecuación de Young-Laplace

Presión de vapor en superficies curvas: ecuación de Kelvin

Capilaridad

- Termodinámica de superficies en sistemas multicomponente: Isoterma de adsorción de Gibbs.
- Monocapas

Tema 7. Superficies Sólidas: Adsorción y Catálisis

- Estructura y composición de superficies sólidas
- Adsorción de gases sobre sólidos
- Isotermas de adsorción
- Velocidad de los procesos superficiales
- Características de los fenómenos catalíticos
- Mecanismos de catálisis y energía de activación
- Características de la catálisis heterogénea
- Etapas de la catálisis heterogénea
- Mecanismos de catálisis heterogénea
- Ejemplos de catálisis heterogénea

Tema 8. Interfases Electrizadas

- Introducción
- Termodinámica de la Interfase Electrizada
- Estructura de la Interfase
 - Modelo de Helmholtz-Perrin o de la doble capa rígida
 - Modelo de Gouy-Chapman o de la doble capa difusa
 - Modelo de Stern
- Doble Capa y Coloides

Bloque IV. Introducción a los Polímeros

Tema 9. Química Física de los Polímeros

- Definiciones generales
- Clasificación y tipos de polímeros
- Distribución de pesos moleculares
- Configuración y conformación
- Termodinámica de polímeros en disolución

IX.- BIBLIOGRAFÍA DE REFERENCIA

Bibliografía básica:

- I. Tuñón & E. Silla
Química Molecular Estadística
Síntesis, Madrid, 2008
- J. Bertrán y J. Núñez (coords)
Química Física
Ariel, Barcelona 2002
- I. Levine
Fisicoquímica (4ª ed.)
McGraw-Hill, Madrid 1999
- P. Atkins
Química Física (6ª ed.)
Omega, Barcelona 1999
- T. Engel & P. Reid
Química Física
Pearson, Madrid 2006
- D. A. McQuarrie & J. D. Simons
Physical Chemistry. A Molecular Approach
University Science Books, Sausalito 1997

Bibliografía complementaria:

Bloque I:

- M. Diaz Peña y A. Roig Muntaner
Química Física
Ed. Alhambra, Madrid 1972
- R. S. Berry, S. A. Rice & J. Ross
Physical Chemistry (2ª ed.)
Oxford University Press, New York, 2000

Bloque II:

- J. Bertrán, V. Branchadell, M. Moreno, M. Sodupe
Química Cuántica
Síntesis, Madrid, 2002
- L J. W. Moore and R. G. Pearson
Kinetics and Mechanism (3ª ed.)
Wiley & Sons, New York, 1981

Bloque III:

- J. A. Rodríguez Renuncio, J. J. Ruiz Sánchez y J. S. Urieta
Termodinámica química
Síntesis, Madrid 1998
- A. W. Adamson and A. P. Gast
Physical Chemistry of Surfaces
Wiley & Sons, New York 1997

Bloque IV:

- A. Horta
Macromoléculas
UNED, Madrid, 1988
- G. Challa
Polymers Chemistry
Ellis Horwood, 1993.

CONOCIMIENTOS PREVIOS

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

METODOLOGÍA

El desarrollo de la asignatura se estructura en torno a dos ejes principales: las sesiones de teoría y problemas y las tutorías.

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 profesor (disponibles en la página web www.uv.es/tunon) 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.

Al final de cada tema se realizarán sesiones de tutoría donde se resolverán cuestiones y problemas propuestos por el profesor con antelación. Estas cuestiones y problemas pretenden exponer al alumno a preguntas similares a las que se puede encontrar en el examen.

EVALUACIÓN DEL APRENDIZAJE

La evaluación de la asignatura se realizará a través de dos exámenes cuatrimestrales o un examen final. Los exámenes consisten en una serie de cuestiones teóricas y prácticas (problemas) divididas en varios apartados. Ejemplos de exámenes de otros años pueden encontrarse en la página: www.uv.es/tunon. Para aprobar la asignatura será necesario obtener una nota mínima de 4.0 en cada uno de los exámenes realizados, sean parciales o finales.

Además de la nota del examen se podrán considerar otras calificaciones obtenidas por participación en clase y tutorías, los proyectos/trabajos propuestos a los alumnos a lo largo del curso y la participación en las actividades interdisciplinares (con un total de hasta el 20%).

Para aprobar la asignatura deberá obtenerse una nota total igual o superior a 5.