

**FITXA IDENTIFICATIVA****Dades de l'Assignatura**

Codi	34193
Nom	Química física I
Cicle	Grau
Crèdits ECTS	4.5
Curs acadèmic	2016 - 2017

Titulació/titulacions

Titulació	Centre	Curs	Període
1108 - Grau de Química	Facultat de Química	2	Primer quadrimestre

Matèries

Titulació	Matèria	Caràcter
1108 - Grau de Química	7 - Química Física	Obligatòria

Coordinació

Nom	Departament
TEJERO TOQUERO, ROBERTO	315 - Química Física

RESUM

L'assignatura *Química física I* és obligatòria i s'imparteix en el segon curs del títol de graduat en química durant el primer semestre. En el pla d'estudis actualment en vigor consta d'un total de 4,5 crèdits ECTS.

Amb aquesta assignatura es pretén essencialment que l'alumne aprofundisca en els coneixements de química i física que ha anat assolint el curs anterior. D'aquesta manera, s'establiran els fonaments imprescindibles perquè l'estudiant pugui abordar posteriorment amb èxit l'estudi de les distintes assignatures que conformen la disciplina i adquirir un marc de referència per a totes les matèries del grau de química.

CONEIXEMENTS PREVIS



Relació amb altres assignatures de la mateixa titulació

No heu especificat les restriccions de matrícula amb altres assignatures del pla d'estudis.

Altres tipus de requisits

A fi d'abastar amb èxit l'assignatura, és imprescindible que l'estudiant posseeixca una sèrie de coneixements previs

Nomenclatura i formulació química, tant inorgànica com orgànica.

Ajust de reaccions químiques.

Càlculs estequiomètrics.

Coneixement bàsic de reaccions àcid-base, precipitació i redox.

Coneixement bàsic de piles i de l'equació de Nernst.

COMPETÈNCIES

1108 - Grau de Química

- Desenvolupar capacitat d'anàlisi, síntesi i raonament crític.
- Demostrar capacitat inductiva i deductiva.
- Demostrar capacitat de gestió i direcció, esperit emprenedor, iniciativa, creativitat, organització, planificació, control, lideratge, presa de decisions i negociació.
- Resoldre problemes de forma efectiva.
- Demostrar capacitat de treball en equip incloent equips de caràcter interdisciplinari i en un context internacional.
- 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.
- Comprometre's amb l'ètica, els valors d'igualtat i la responsabilitat social com a ciutadà i com professional.
- Aprendre de forma autònoma.
- Demostrar capacitat per a adaptar-se a situacions noves.
- Adquirir una sensibilitat permanent per la qualitat i el medi ambient, el desenvolupament sostenible i la prevenció de riscos laborals.
- Demostrar que coneix els aspectes principals de terminologia química, nomenclatura, convenis i unitats.
- Interpretar la variació de les propietats característiques dels elements químics segons la taula periòdica.
- Demostrar que coneix les característiques i el comportament dels diferents estats de la matèria i les teories usades per descriure'ls.



- Demostrar que coneix els tipus principals de reacció química i les seues característiques principals associades.
- 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.
- Relacionar les propietats macroscòpiques i propietats d'àtoms i molècules individuals, incloent-hi macromolècules (naturals i sintètiques), polímers, col·loides i altres materials.
- Demostrar el coneixement i la comprensió dels fets essencials, dels conceptes, dels principis i de les teories relacionades amb les àrees de la química.
- Resoldre problemes qualitatius i quantitatius segons models desenvolupats prèviament.
- Reconèixer i analitzar problemes nous i planejar estratègies per solucionar-los.
- Avaluar, interpretar i sintetitzar les dades i la informació Química.
- Manipular amb seguretat els productes químics.
- Manejar la instrumentació química utilitzada en les diferents àrees de la Química.
- Interpretar les dades procedents d'observacions i mesures en el laboratori en termes de la seua significació i de les teories que la sustenten.
- Relacionar teoria i experimentació.
- Reconèixer i valorar els processos químics en la vida diària.
- Comprendre els aspectes qualitatius i quantitatius dels problemes químics.
- Desenvolupar metodologies sostenibles i respectuoses amb el medi ambient.
- Relacionar la química amb altres disciplines.
- Que els estudiants sàpien aplicar els seus coneixements al seu treball o vocació d'una forma professional i posseïsquen les competències que solen demostrar-se per mitjà de l'elaboració i defensa d'arguments i la resolució de problemes dins de la seua àrea d'estudi.
- 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.
- Que els estudiants puguin transmetre informació, idees, problemes i solucions a un públic tant especialitzat com no especialitzat.
- Que els estudiants hagen desenvolupat aquelles habilitats d'aprenentatge necessàries per a emprendre estudis posteriors amb un alt grau d'autonomia.
- Expressar-se correctament, tant en forma oral com escrita, en qualsevol de les llengües oficials de la Comunitat Valenciana.
- Posseir habilitats bàsiques en tecnologies de la informació i comunicació i gestionar adequadament la informació obtinguda.



RESULTATS DE L'APRENTATGE

Quan acabe l'assignatura *Química física I* l'estudiant ha de ser capaç de:

- Obtenir l'orde i la constant de velocitat de reaccions químiques senzilles i complexes a partir de dades experimentals i utilitzar distints mètodes per a la seua determinació. Utilització dels coneixements adquirits en *Aplicacions informàtiques*.
- Comprendre les aproximacions de l'etapa limitant i de l'estat estacionari per establir si un mecanisme proposat per a una reacció química és compatible amb les dades cinètiques disponibles.
- Conèixer alguns mecanismes de reaccions complexes i entendre la catàlisi.
- Extraure informació d'un diagrama de fases d'una substància pura.
- Utilitzar l'equació de Clapeyron per a deduir una expressió aproximada de l'equació sòlid-líquid i l'equació de Clausius-Clapeyron (equació fase no condensada-fase condensada) i utilitzar aquesta expressió per a deduir la dependència de la pressió de vapor amb la temperatura.
- Calcular punts de fusió i ebullició a partir de magnituds termodinàmiques i al revés.
- Calcular la variació del punt de fusió amb la pressió
- Calcular magnituds molars parcials.
- Càlcul de magnituds termodinàmiques de mescla per a dissolucions ideals
- Càlcul de pressions de vapor utilitzant la llei de Raoult i Henry.
- Càlcul de la constant de la llei de Henry usant pressions de vapor de dissolucions diluïdes.
- Càlcul de l'augment del punt d'ebullició i descens del punt de congelació a partir de dades temperatura-composició.
- Càlcul de la pressió osmòtica en dissolucions diluïdes ideals.
- Càlcul de coeficients d'activitat a partir de mesures de pressió de vapor usant els dos convenis (simètric i asimètric).
- Càlcul de funcions termodinàmiques i d'excés per a dissolucions reals
- Càlcul de coeficients d'activitat d'un solut no volàtil a partir de dades de pressió de vapor del dissolvent i propietats col·ligatives, usant l'equació de Gibbs-Duhem.
- Construir i interpretar diagrames P-x i T-x de dissolucions binàries.
- Usar un diagrama temperatura-composició d'una mescla per a analitzar la destil·lació d'aquesta
- Conèixer l'aplicació de l'equació de Gibbs-Duhem-Margules.
- Calcular coeficients d'activitat iònic mitjans a partir de pressions de vapor i propietats col·ligatives.
- Conèixer la validesa de les expressions teòriques per calcular coeficients d'activitat iònic mitjans (lleí límit o ampliada de Debye-Hückel, equació de Davies).
- Càlcul de la constant d'equilibri i de la variació del potencial de Gibbs a partir de la composició d'equilibri.
- Càlcul de la constant d'equilibri a partir de la variació del potencial de Gibbs .
- Calcular les quantitats de les distintes substàncies que hi ha en un sistema quan aquest aconseguix l'estat d'equilibri.
- Predir el desplaçament d'un equilibri químic quan és sotmès a una modificació de les condicions d'equilibri.
- Càlcul de constants d'equilibri en sistemes no ideals partint de la variació del potencial de Gibbs .
- Càlcul de les molalitats d'equilibri en equilibris d'electròlits (ionització d'àcids, sals poc solubles) usant l'equació de Davies per a estimar els coeficients d'activitat.
- Càlcul del potencial estàndard de la reacció de la pila utilitzant la seua relació amb la variació del potencial de Gibbs
- Càlcul de potencial estàndard a partir de la taula de potencials normals d'elèctrode
- Càlcul de potencial estàndard d'una pila galvànica reversible utilitzant l'equació de Nernst.



- Càlcul de propietats termodinàmiques de la reacció d'una pila a partir de dades de potencial estàndard enfront de T.
- Càlcul de les constants d'equilibri a partir de les dades de potencial estàndard.
- Càlcul dels coeficients d'activitat d'electròlits a partir de les dades del potencial d'una pila utilitzant la condició d'equilibri electroquímic en els elèctrodes.

DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

1. Cinètica formal.

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

2. Sistemes oberts i canvis de composició. Propietats molars parcials i potencial químic.

Introducció. Propietats de la funció de Gibbs (energia lliure). Dependència de la funció de Gibbs respecte de la temperatura. Dependència de la funció de Gibbs respecte de la pressió. Descripció termodinàmica de les mescles. Magnituds (propietats) molars parcials. Funció molar parcial de Gibbs o potencial químic. Equilibri material. Equació de Gibbs-Duhem. Relació entre magnituds molars parcials. Funcions termodinàmiques de mescla. Potencial químic del gas ideal i de mescles de gasos ideals.

3. Aplicacions senzilles de l'equilibri material.

Canvis d'estat de substàncies pures i termodinàmica de dissolucions ideals. Concepte de fase i de component. Regla de les fases. Diagrames de fases de sistemes d'un component. Exemples. Equilibri de fases. Estabilitat de les fases, corbes de potencial químic (μ) enfront de T. Dependència de les corbes de μ enfront de T amb la pressió. Equació de Clapeyron. Variació de la pressió d'equilibri amb la temperatura. Equilibri sòlid-líquid. Equilibri líquid/gas. Equilibri sòlid/gas. Potencial químic dels líquids (dissolucions). Dissolucions ideals: llei de Raoult. Propietats termodinàmiques de les dissolucions. Dissolucions ideals diluïdes: llei de Henry. Propietats termodinàmiques.

4. Propietats col·ligatives. Coeficients d'activitat.

Introducció. Propietats col·ligatives. Característica comuna de les propietats col·ligatives. Descens de la pressió de vapor. Elevació del punt d'ebullició. Descens del punt de congelació. Pressió osmòtica. Dissolucions reals: activitats i coeficients d'activitat. L'activitat del dissolvent. Conveni simètric (I). L'activitat del solut. Conveni asimètric (II). Convenis, escales i estats de referència. Determinació d'activitats i coeficients d'activitat. Determinació del coeficients d'activitat a partir de mesures de la pressió de vapor. Determinació del coeficient d'activitat a partir de propietats col·ligatives. Equació de Gibbs-Duhem-Margules. Funcions termodinàmiques d'excés.



5. Equilibris de fase de dissolucions binàries.

Introducció. Diagrames de fase per a dissolucions binàries. Diagrames pressió de vapor-composició. Diagrames temperatura-composició. Representació de la destil·lació. Destil·lació de dissolucions reals: Azeòtrops. Destil·lació de líquids immiscibles.

6. Dissolucions d'electròlits.

Introducció. Dissolucions d'electròlits. Potencial químic d'un compost electrolític. Potencial químic d'un electròlit. Determinació de coeficients d'activitat d'electròlits. El coeficient osmòtic pràctic del dissolvent. Determinació del coeficient d'activitat iònic a partir de mesures de propietats col·ligatives. Comportament empíric de dissolucions d'electròlits. Model de Debye-Hückel per a dissolucions d'electròlits

7. Equilibri químic.

Introducció. Reaccions químiques espontànies. El mínim en la funció de Gibbs. Condició termodinàmica d'equilibri químic. Afinitat. Equilibri químic en una mescla de gasos ideals. Constants d'equilibri en funció de concentracions i fraccions molars. Variació de la constant d'equilibri amb la temperatura i la pressió. El principi de Le Chatelier. Equilibri químic en gasos reals. Fugacitat d'un gas real. Equilibri químic en dissolucions ideals no electrolítiques. Equilibri químic en dissolucions reals no electrolítiques. Equilibris heterogenis. Equilibris iònics (dissolucions d'electròlits). Equilibris de ionització d'àcids dèbils. Equilibris de solubilitat.

8. Equilibri electroquímic.

Potencial d'elèctrode. Propietats del potencial electroquímic. Tipus d'elèctrodes. Força electromotriu. 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 FEM: coeficient d'activitat, pK, producte de solubilitat i predicció de l'espontaneïtat de reaccions redox i de la corrosió metàl·lica.

**VOLUM DE TREBALL**

ACTIVITAT	Hores	% Presencial
Classes de teoria	38,00	100
Tutories reglades	7,00	100
Estudi i treball autònom	30,00	0
Preparació d'activitats d'avaluació	16,00	0
Preparació de classes de teoria	6,50	0
Preparació de classes pràctiques i de problemes	15,00	0
TOTAL	112,50	

METODOLOGIA DOCENT

El desenvolupament de l'assignatura s'estructura en tres eixos: les classes teoricopràctiques, els seminaris i altres activitats en les hores no presencials. En les primeres s'oferirà una visió global del tema tractat i s'incidirà en els conceptes clau per a la seua comprensió. Així mateix, s'indicaran els recursos més recomanables per a la preparació posterior del tema en profunditat.

En algunes sessions presencials s'explicarà a l'alumne una sèrie de problemes-tipus gràcies als quals aprendrà a identificar els elements essencials del plantejament i la resolució dels problemes que es plantegen en aquest tema. En altres sessions, en canvi, el protagonisme passarà per complet a les mans de l'estudiant, ja que serà ell mateix qui s'haurà d'enfrontar amb problemes anàlegs i de major complexitat. Els alumnes es distribuïran en grups i el professor s'encarregarà de guiar-los i ajudar-los.

Pel que fa a les tutories, se n'han preparat set sessions al llarg del quadrimestre. En aquestes sessions el professor orientarà l'alumne sobre tots els elements que conformen el procés d'aprenentatge, tant pel que fa a plantejaments de caràcter global com a qüestions concretes. Així mateix, l'alumne hi rebrà na llista de preguntes i problemes addicionals que li serviran per a reforçar els seus coneixements i exercitar-se en cada un dels aspectes que es tracten en les sessions de classe. L'alumne haurà d'entregar resolt els problemes i les qüestions que el professor indique.

AVALUACIÓ

L'aprenentatge dels alumnes s'avaluarà de tres formes diferents:

1. Avaluació contínua dels progressos i de les activitats realitzades al llarg del curs, la qual es basarà en gran manera en les qüestions i els problemes entregats als alumnes i en el treball fet en les sessions de tutoria. La nota obtinguda en aquest apartat constituirà un 20% de la nota final.
2. El 10% addicional s'obindrà per mitjà de la realització i l'exposició d'un o més treballs.
3. Un examen final que contribuirà a la nota definitiva (70%). L'examen es compondrà d'una primera part de preguntes objectives, dedicades als coneixements considerats com absolutament bàsics, i una segona part més general que inclourà problemes.



A més a més, serà necessari assolir en cadascun dels apartats considerats en l'avaluació total una nota mínima del 40% del total de l'apartat corresponent.

En casos excepcionals i justificats, l'estudiant podrà sol·licitar per escrit a l'inici del curs ser avaluat únicament amb la modalitat d'un examen final.

En cas de segona convocatòria es mantindran el criteris exposats per a la primera.

REFERÈNCIES

Bàsiques

- Engel, T y Reid, P. Química Física. Pearson Addison Wesley, 2006. ISBN 9788478290772
- Atkins, P. y De Paula, J. Química Física. 8ª ed. Editorial Médica Panamericana, 2008. ISBN 9789500612487
- Levine, I. N. Fisicoquímica. 5ªed. MacGraw-Hill, 2004. ISBN 9788448137861 (v. 1) ISBN 9788448137878 (v. 2)