

**FICHA IDENTIFICATIVA****Datos de la Asignatura**

Código	34193
Nombre	Química Física I
Ciclo	Grado
Créditos ECTS	4.5
Curso académico	2017 - 2018

Titulación(es)

Titulación	Centro	Curso	Periodo
1108 - Grado de Química	Facultad de Química	2	Primer cuatrimestre

Materias

Titulación	Materia	Caracter
1108 - Grado de Química	7 - Química Física	Obligatoria

Coordinación

Nombre	Departamento
TEJERO TOQUERO, ROBERTO	315 - Química Física

RESUMEN

La asignatura de Química Física I es una asignatura obligatoria que se imparte en el segundo curso del título de Graduado en Química durante el primer semestre. En el plan de estudios actualmente en vigor consta de un total de 4,5 créditos ECTS.

Con esta asignatura se pretende, esencialmente, que el alumno profundice en los conocimientos de Química y Física que ha ido obteniendo en el curso anterior y que, los aplique a los procesos químicos. De este modo, se establecerán los cimientos imprescindibles para que el estudiante pueda abordar posteriormente con éxito el estudio de las distintas asignaturas que conforman la disciplina y adquirir un marco de referencia para todas las materias del grado de la Química.



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

Para abordar con éxito la asignatura es imprescindible que los estudiantes posean una serie de conocimientos previos:

- Nomenclatura y formulación química, tanto inorgánica como orgánica.
- Ajuste de reacciones químicas.
- Cálculos estequiométricos.
- Conocimiento básico de reacciones ácido-base, precipitación y redox.
- Conocimiento básico de pilas y de la ecuación de Nernst.

COMPETENCIAS

1108 - Grado de Química

- Desarrollar capacidad de análisis, síntesis y razonamiento crítico.
- Demostrar capacidad inductiva y deductiva.
- Demostrar capacidad de gestión y dirección, espíritu emprendedor, iniciativa, creatividad, organización, planificación, control, liderazgo, toma de decisiones y negociación.
- Resolver problemas de forma efectiva.
- Demostrar capacidad de trabajo en equipo incluyendo equipos de carácter interdisciplinar y en un contexto internacional.
- 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.
- Comprometerse con la ética, los valores de igualdad y la responsabilidad social como ciudadano y como profesional.
- Aprender de forma autónoma.
- Demostrar capacidad para adaptarse a nuevas situaciones.
- Adquirir una sensibilidad permanente por la calidad y el medio ambiente, el desarrollo sostenible y la prevención de riesgos laborales.
- Demostrar que conoce los aspectos principales de terminología química, nomenclatura, convenios y unidades.
- Interpretar la variación de las propiedades características de los elementos químicos según la Tabla Periódica.



- Demostrar que conoce las características y comportamiento de los diferentes estados de la materia y las teorías empleadas para describirlos.
- Demostrar que conoce los tipos principales de reacción química y sus principales características asociadas.
- 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.
- Relacionar las propiedades macroscópicas y propiedades de átomos y moléculas individuales, incluyendo macromoléculas (naturales y sintéticas), polímeros, coloides y otros materiales.
- Demostrar el conocimiento y comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionadas con las áreas de la Química.
- Resolver problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados.
- Reconocer y analizar nuevos problemas y planear estrategias para solucionarlos.
- Evaluar, interpretar y sintetizar los datos e información Química.
- Manipular con seguridad los productos químicos.
- Manejar la instrumentación química utilizada en las distintas áreas de la Química.
- Interpretar los datos procedentes de observaciones y medidas en el laboratorio en términos de su significación y de las teorías que la sustentan.
- Relacionar teoría y experimentación.
- Reconocer y valorar los procesos químicos en la vida diaria.
- Comprender los aspectos cualitativos y cuantitativos de los problemas químicos.
- Desarrollar metodologías sostenibles y respetuosas con el medio ambiente.
- Relacionar la Química con otras disciplinas.
- Que los estudiantes sepan aplicar sus conocimientos a su trabajo o vocación de una forma profesional y posean las competencias que suelen demostrarse por medio de la elaboración y defensa de argumentos y la resolución de problemas dentro de su área de estudio.
- 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.
- Que los estudiantes puedan transmitir información, ideas, problemas y soluciones a un público tanto especializado como no especializado.
- Que los estudiantes hayan desarrollado aquellas habilidades de aprendizaje necesarias para emprender estudios posteriores con un alto grado de autonomía.
- Expresarse correctamente, tanto en forma oral como escrita, en cualquiera de las lenguas oficiales de la Comunidad Valenciana.



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

RESULTADOS DE APRENDIZAJE

Al finalizar la asignatura, el/la estudiante ha de ser capaz de:

- Obtener el orden y la constante de velocidad de reacciones químicas sencillas y complejas a partir de datos experimentales y utilizar distintos métodos para su determinación. Utilización de los conocimientos adquiridos en Aplicaciones Informáticas.
- Emplear las aproximaciones de la etapa limitante y del estado estacionario para establecer si un mecanismo propuesto para una reacción química es compatible con los datos cinéticos disponibles.
- Conocer algunos mecanismos de reacciones complejas y entender la catálisis.
- Extraer información a partir de un diagrama de fases de una sustancia pura.
- Utilizar la ecuación de Clapeyron para deducir una expresión aproximada para la ecuación sólido-líquido y la ecuación de Clausius-Clapeyron (ecuación fase no condensada-fase condensada), y utilizar esa expresión para deducir la dependencia de la presión de vapor con la temperatura.
- Calcular puntos de fusión y ebullición a partir de magnitudes termodinámicas y a la inversa.
- Calcular la variación del punto de fusión con la presión
- Calcular magnitudes molares parciales.
- Cálculo de magnitudes termodinámicas de mezcla para disoluciones ideales
- Cálculo de presiones de vapor utilizando la ley de Raoult y Henry.
- Cálculo de la constante de ley de Henry usando presiones de vapor de disoluciones diluidas.
- Cálculo del aumento del punto de ebullición y descenso del punto de congelación a partir de datos temperatura-composición.
- Cálculo de la presión osmótica en disoluciones diluidas ideales.
- Cálculo de coeficientes de actividad a partir de medidas de presión de vapor usando los dos convenios (simétrico y asimétrico).
- Cálculo de funciones termodinámicas y de exceso para disoluciones reales
- Cálculo de coeficientes de actividad de un soluto no volátil a partir de datos de presión de vapor del disolvente y propiedades coligativas, usando la ecuación de Gibbs-Duhem.
- Construir e interpretar diagramas P-x y T-x de disoluciones binarias.
- Usar un diagrama temperatura-composición de una mezcla para analizar la destilación de una mezcla
- Conocer la aplicación de la ecuación de Gibbs-Duhem-Margules.
- Calcular coeficientes de actividad iónico medios a partir de presiones de vapor y propiedades coligativas.
- Conocer la validez de las expresiones teóricas para calcular coeficientes de actividad iónico medios (ley límite o ampliada de Debye-Hückel, ecuación de Davies).
- Cálculo de constantes de equilibrio y variación de entalpía libre a partir de la composición de equilibrio.
- Cálculo de constantes de equilibrio a partir de variación de entalpía libre.
- Calcular las cantidades de las distintas sustancias presentes en un sistema cuando éste alcanza el estado de equilibrio.
- Predecir el desplazamiento de un equilibrio químico cuando se le somete a una modificación de las condiciones de equilibrio.
- Cálculo de constantes de equilibrio en sistemas no ideales partiendo de variación de entalpía libre.



- Cálculo de molalidades de equilibrio en equilibrios de electrolitos (ionización de ácidos, sales poco solubles) usando la ecuación de Davies para estimar los coeficientes de actividad.
- Cálculo de potencial estándar de la reacción de la pila utilizando su relación con la entalpía libre.
- Cálculo de potencial estándar a partir de la tabla de potenciales normales de electrodo
- Cálculo de potencial estándar de una pila galvánica reversible utilizando la ecuación de Nernst.
- Cálculo de propiedades termodinámicas de la reacción de una pila a partir de la variación del potencial con la T.
- Cálculo de las constantes de equilibrio a partir de los datos de potencial estándar.

Cálculo de los coeficientes de actividad de electrolitos a partir de los datos del potencial de una pila utilizando la condición de equilibrio electroquímico en los electrodos.

DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS

1. Cinética Formal.

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

2. Sistemas abiertos y cambios de composición. Propiedades molares parciales y potencial químico.

Introducción. Propiedades de la función de Gibbs (energía libre). Dependencia de la función de Gibbs con la Temperatura. Dependencia de la función de Gibbs con la Presión. Descripción termodinámica de las mezclas. Magnitudes (propiedades) molares parciales. Función molar parcial de Gibbs o potencial químico. Equilibrio material. Ecuación de Gibbs-Duhem. Relación entre magnitudes molares parciales. Funciones termodinámicas de mezcla. Potencial químico del gas ideal y de mezclas de gases ideales.

3. Aplicaciones sencillas del equilibrio material

Cambios de estado de sustancias puras y Termodinámica de disoluciones ideales. Concepto de fase y de componente. Regla de las fases. Diagramas de fases de sistemas de un componente. Ejemplos. Equilibrio de fases. Estabilidad de las fases, curvas de potencial químico (μ) frente a T. Dependencia de las curvas de μ frente a T con la presión. Ecuación de Clapeyron. Variación de la presión de equilibrio con la temperatura. Equilibrio sólido-líquido. Equilibrio líquido/gas. Equilibrio sólido/gas. Potencial químico de los líquidos (disoluciones). Disoluciones ideales: Ley de Raoult. Propiedades termodinámicas de las disoluciones. Disoluciones ideales diluidas: Ley de Henry. Propiedades termodinámicas.

**4. Propiedades coligativas. Coeficientes de actividad.**

Introducción. Propiedades coligativas. La característica común de las propiedades coligativas. Descenso de la presión de vapor. Elevación del punto de ebullición. Descenso del punto de congelación. Presión osmótica. Disoluciones reales: actividades y coeficientes de actividad. La actividad del disolvente. Convenio simétrico (I). La actividad del soluto. Convenio asimétrico (II). Convenios, escalas y estados de referencia. Determinación de actividades y coeficientes de actividad. Determinación del coeficientes de actividad a partir de medidas de la presión de vapor. Determinación del coeficientes de actividad a partir de propiedades coligativas. Ecuación de Gibbs-Duhem-Margules. Funciones termodinámicas de exceso.

5. Equilibrios de fase de disoluciones binarias.

Introducción. Diagramas de fase para disoluciones binarias. Diagramas presión de vapor-composición. Diagramas Temperatura-composición. Representación de la destilación. Destilación de disoluciones reales: Azeótropos. Destilación de líquidos inmiscibles.

6. Disoluciones de electrolitos.

Introducción. Disoluciones de electrolitos. Potencial químico de un compuesto electrolítico. Potencial químico de un electrolito. Determinación de coeficientes de actividad de electrolitos. El coeficiente osmótico práctico del disolvente. Determinación del coeficiente de actividad iónico a partir de medidas de propiedades coligativas. Comportamiento empírico de disoluciones de electrolitos. Modelo de Debye-Hückel para disoluciones de electrolitos.

7. Equilibrio Químico.

Introducción. Reacciones químicas espontáneas. El mínimo en la función de Gibbs. Condición termodinámica de equilibrio químico. Afinidad. Equilibrio químico en una mezcla de gases ideales. Constantes de equilibrio en función de concentraciones y fracciones molares. Variación de la constante de equilibrio con la temperatura y la presión. El principio de Le Chatelier. Equilibrio químico en gases reales. Fugacidad de un gas real. Equilibrio químico en disoluciones ideales no electrolíticas. Equilibrio químico en disoluciones reales no electrolíticas. Equilibrios heterogéneos. Equilibrios iónicos (disoluciones de electrolitos). Equilibrios de ionización de ácidos débiles. Equilibrios de solubilidad.

8. Equilibrio electroquímico.

Potencial de electrodo. Propiedades del potencial electroquímico. Tipos de electrodos. Fuerza electromotriz. 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 F.E.M.: coeficiente de actividad, pK, producto de solubilidad, y predicción de la espontaneidad de reacciones redox y de la corrosión metálica.



VOLUMEN DE TRABAJO

ACTIVIDAD	Horas	% Presencial
Clases de teoría	38,00	100
Tutorías regladas	7,00	100
Estudio y trabajo autónomo	30,00	0
Preparación de actividades de evaluación	16,00	0
Preparación de clases de teoría	6,50	0
Preparación de clases prácticas y de problemas	15,00	0
TOTAL	112,50	

METODOLOGÍA DOCENTE

El desarrollo de la asignatura se estructura en torno a tres ejes: las clases teórico-prácticas, las conferencias y/o seminarios y otras actividades en las horas no presenciales. Por lo que respecta a las primeras, en ellas se ofrecerá una visión global del tema tratado y se incidirá en aquellos conceptos clave para la comprensión del mismo. Asimismo, se le indicará los recursos más recomendables para la preparación posterior del tema en profundidad.

En algunas sesiones presenciales se le explicará al alumno una serie de problemas-tipo gracias a los cuales aprenda a identificar los elementos esenciales del planteamiento y la resolución de los problemas propuestos de este tema. En otras sesiones, en cambio, el protagonismo pasará por completo a manos del alumno, ya que será él mismo quien se tendrá que enfrentar con problemas análogos y de mayor complejidad. Los alumnos se distribuirán en grupos y el profesor se encargará de guiarlos y ayudarlos.

Por lo que respecta a las tutorías, habrá 7 sesiones a lo largo del cuatrimestre. En ellas, el profesor orientará al alumno sobre todos los elementos que conforman el proceso de aprendizaje, tanto en lo que se refiere a planteamientos de carácter global como a cuestiones concretas. Asimismo, el alumno recibirá en ellas una lista de preguntas y problemas adicionales que le servirán para reforzar sus conocimientos y ejercitarse en cada uno de los aspectos tratados en las sesiones de clase. El alumno deberá entregar resueltos los problemas y cuestiones que el Profesor indique.

Por lo que respecta a las conferencias programadas donde se abordarán temas de actualidad, al final de la conferencia los alumnos contestarán un test con preguntas relacionadas con el contenido de la conferencia.

EVALUACIÓN

La evaluación del aprendizaje de los alumnos se llevará a cabo de tres formas diferentes:



1. Evaluación continua de los progresos y de las actividades desarrolladas a lo largo del curso, la cual se basará, en gran medida, en las cuestiones y problemas entregados a los alumnos y del trabajo desarrollado en las sesiones de tutoría. La nota obtenida en este apartado constituirá un 20% de la nota final. La asistencia a las conferencias interdisciplinarias se evaluará mediante un test cuya nota se añadirá en un 5% a la calificación de la nota de la evaluación continua.
2. Un 10% adicional se obtendrá mediante la realización y exposición de uno o más trabajos.
3. un examen final que contribuirá hasta la nota definitiva (70%). El examen se compondrá de una primera parte de preguntas objetivas, dedicadas a aquellos conocimientos considerados como absolutamente básicos y una segunda parte más general que incluya problemas.

Además será necesario que en cada uno de los apartados considerados en la evaluación total se alcance una nota mínima del 40% del total del apartado correspondiente.

En casos excepcionales y justificados, el estudiante podrá solicitar por escrito a principio del curso ser evaluado únicamente por la modalidad de un examen final.

En el caso de segunda convocatoria se aplicarán los mismos criterios expuestos para la primera.

REFERENCIAS

Básicas

- 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)