

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

Código	34193
Nombre	Química Física I
Ciclo	Grado
Créditos ECTS	4.5
Curso académico	2022 - 2023

Titulación(es)

Titulación	Centro	Curso	Periodo
1110 - Grado de Química V2-2018	Facultad de Química	2	Segundo cuatrimestre

Materias

Titulación	Materia	Caracter
1110 - Grado de Química V2-2018	7 - Química Física	Obligatoria

Coordinación

Nombre	Departamento
SANCHEZ DE MERAS, ALFREDO	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 segundo 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

El apartado anterior recoge las competencias contenidas en el documento VERIFICA. En esta asignatura se abordan parte de los resultados de aprendizaje de la materia Química Física I que permiten adquirir, tanto conocimientos específicos de Química, como habilidades y competencias cognitivas y competencias generales recomendadas por la EUROPEAN CHEMISTRY THEMATIC NETWORK (ECTN) for the Chemistry Eurobachelor® Label. En la siguiente tabla se relacionan los resultados de aprendizaje adquiridos en la asignatura de Química Física I relacionados con las competencias del grado en Química.

CONOCIMIENTOS ESPECÍFICOS DE QUÍMICA	
El proceso de aprendizaje debe permitir a los titulados de grado demostrar:	
	Competencias de la asignatura QUÍMICA FÍSICA I que contemplan los resultados de aprendizaje EUROBACHELOR®
Las características de los diferentes estados de la materia y las teorías utilizadas para describirlos.	Demostrar que conoce las características y comportamiento de los diferentes estados de la materia y las teorías empleadas para describirlos (CE3).
Los principios de la termodinámica y su aplicación a la química.	Demostrar que conoce los principios de termodinámica y cinética y sus aplicaciones en Química (CE6).
La cinética del cambio químico, incluida la catálisis; la interpretación mecánica de las reacciones químicas.	Demostrar que conoce los principios de termodinámica y cinética y sus aplicaciones en Química (CE6).
COMPETENCIAS Y HABILIDADES COGNITIVAS	
El proceso de aprendizaje debe permitir a los titulados de grado demostrar:	
	Competencias del título de grado que contemplan



	los resultados de aprendizaje EUROBACHLEOR®
Capacidad para demostrar conocimiento y comprensión de los hechos, conceptos, principios y teorías fundamentales relacionadas con los temas mencionados anteriormente.	Demostrar el conocimiento y comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionadas con las áreas de la Química (CE13).
Capacidad para aplicar dicho conocimiento y comprensión a la solución de problemas comunes cualitativos y cuantitativos.	Resolver problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados (CE14). Reconocer y analizar nuevos problemas y planear estrategias para solucionarlos (CE15). Comprender los aspectos cualitativos y cuantitativos de los problemas químicos (CE24).
Competencias para presentar y argumentar temas científicos de forma oral y escrita a una audiencia especializada.	Relacionar la Química con otras disciplinas (CE26). 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 (CG6). Que los estudiantes puedan transmitir información, ideas, problemas y soluciones a un público tanto especializado como no especializado (CB4).
Capacidad para el cálculo y el procesamiento de datos, relacionados con información y datos de química.	Resolver problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados (CE14). Reconocer y analizar nuevos problemas y planear estrategias para solucionarlos (CE15).

COMPETENCIAS Y HABILIDADES RELACIONADAS CON LA PRÁCTICA DE LA QUÍMICA

El proceso de aprendizaje debe permitir a los titulados de grado demostrar:

Competencias del título de grado que contemplan



	los resultados de aprendizaje EUROBACHELOR®
COMPETENCIAS GENERALES	
El proceso de aprendizaje debe permitir a los titulados de grado demostrar:	
	Competencias del título de grado que contemplan los resultados de aprendizaje EUROBACHLEOR®
Capacidad para aplicar conocimiento práctico para la resolución de problemas relacionados con información cualitativa y cuantitativa.	Resolver problemas de forma efectiva (CG4). Resolver problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados (CE14). Relacionar teoría y experimentación (CE22). Reconocer y valorar los procesos químicos en la vida diaria (CE23). Comprender los aspectos cualitativos y cuantitativos de los problemas químicos (CE24).
Capacidades de cálculo y aritméticas, incluyendo aspectos tales como error de análisis, estimaciones de órdenes de magnitud, y uso correcto de las unidades.	Desarrollar capacidad de análisis, síntesis y razonamiento crítico (CG1). Demostrar capacidad inductiva y deductiva (CG2). Resolver problemas de forma efectiva CG4).
Capacidad de adaptarse a nuevas situaciones y tomar decisiones.	Demostrar capacidad para adaptarse a nuevas situaciones (CG9). Reconocer y analizar nuevos problemas y planear estrategias para solucionarlos (CE15). 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 (CB3).



Habilidades de planificación y gestión del tiempo.	Desarrollar capacidad de análisis, síntesis y razonamiento crítico (CG1). Resolver problemas de forma efectiva (CG4).
Competencias de estudio necesarias para el desarrollo profesional. Éstas incluirán la habilidad de trabajar de forma autónoma.	Demostrar capacidad de trabajo en equipo incluyendo equipos de carácter interdisciplinar y en un contexto internacional (CG5). Aprender de forma autónoma (CG8). Demostrar capacidad para adaptarse a nuevas situaciones (CG9). Que los estudiantes hayan desarrollado aquellas habilidades de aprendizaje necesarias para emprender estudios posteriores con un alto grado de autonomía (CB5).
Compromiso ético con el Código Europeo de conducta: http://ec.europa.eu/research/participants/data/ref/h2020/other/hi/h2020-ethics_code-of-conduct_en.pdf	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. (CB3).

En relación con los Objetivos de Desarrollo Sostenible (ODS's) en esta asignatura se espera que los/as estudiantes sean capaces de saber aplicar los conocimientos aprendidos para contribuir a garantizar una educación inclusiva, equitativa y de calidad y promover oportunidades de aprendizaje (ODS 4), así como por un desarrollo sostenible y compatible con el medio ambiente (ODS 11, 12, 13, 14 y 15)

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, así como utilizar distintos métodos para su determinación, incluyendo 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.
 - Calcular magnitudes termodinámicas de mezcla para disoluciones ideales
 - Calcular presiones de vapor utilizando la ley de Raoult y Henry.
 - Calcular la constante de ley de Henry usando presiones de vapor de disoluciones diluidas.
 - Calcular el aumento del punto de ebullición y descenso del punto de congelación a partir de datos temperatura-composición.
 - Calcular la presión osmótica en disoluciones diluidas ideales.
 - Calcular coeficientes de actividad a partir de medidas de presión de vapor usando los dos convenios (simétrico y asimétrico).
 - Calcular funciones termodinámicas y de exceso para disoluciones reales
 - Calcular 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 (leyes límite i ampliada de Debye-Huckel, ecuación de Davies).
 - Calcular constantes de equilibrio y variación de entalpía libre a partir de la composición de equilibrio.
 - Calcular constantes de equilibrio a partir de la 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.
 - Calcular constantes de equilibrio en sistemas no ideales partiendo de variación de entalpía libre.
 - Calcular las molalidades de equilibrio en equilibrios de electrolitos (ionización de ácidos, sales poco solubles) usando la ecuación de Davies para estimar los coeficientes de actividad.
 - Calcular el potencial estándar de la reacción de la pila utilizando su relación con la entalpía libre.
 - Calcular el potencial estándar a partir de la tabla de potenciales normales de electrodo
 - Calcular el potencial estándar de una pila galvánica reversible utilizando la ecuación de Nernst.
 - Calcular propiedades termodinámicas de la reacción de una pila a partir de la variación del potencial con la temperatura.
 - 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.

4. Propiedades coligativas. Coeficientes de actividad.

Potencial químico de los líquidos (disoluciones). Disoluciones ideales: Ley de Raoult. Propiedades termodinámicas de las disoluciones. Disoluciones ideales diluidas: Ley de Henry. Propiedades termodinámicas. 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 coeficiente de actividad a partir de medidas de la presión de vapor. Determinación del coeficiente 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, los 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.

EVALUACIÓN

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

1. Evaluación continua de los progresos y de las actividades desarrolladas a lo largo del curso. La nota obtenida en este apartado constituirá un 30% de la nota final.
2. Un examen final que contribuirá a la nota definitiva en un 70%. El examen podrá incluir tanto cuestiones (teóricas y/o numéricas) como problemas. Se requerirá una calificación mínima de 4.0 en el examen final para que se considere la evaluación continua en la calificación global de la asignatura.



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

REFERENCIAS

Básicas

- ENGEL, T., REID, P. Química Física. Pearson Addison Wesley, 2006. ISBN 9788478290772
- ATKINS, P., 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)