

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

Codi	34193
Nom	Química física I
Cicle	Grau
Crèdits ECTS	4.5
Curs acadèmic	2022 - 2023

Titulació/titulacions

Titulació	Centre	Curs	Període
1110 - Grau de Química	Facultat de Química	2	Segon quadrimestre

Matèries

Titulació	Matèria	Caràcter
1110 - Grau de Química	7 - Química Física	Obligatòria

Coordinació

Nom	Departament
SANCHEZ DE MERAS, ALFREDO	315 - Química Física

RESUM

L'assignatura de Química Física I és una assignatura obligatòria que s'imparteix en el segon curs del títol de Graduat en Química durant el segon 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 obtenint en 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 la Química.



CONEXEMENTS 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 posseïssa una sèrie de coneixements previs

Nomenclatura i formulació química, tant inorgànica com orgànica.

Ajust de reaccions químiques.

Càlculs estequiòmètrics.

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

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

COMPETÈNCIES (RD 1393/2007) // RESULTATS DE L'APRENENTATGE (RD 822/2021)

1108 - Grau en 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 quantitativs 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 quantitativs 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'arreplegar 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 puguen 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 D'APRENTATGE (RD 1393/2007) // SENSE CONTINGUT (RD 822/2021)

L'apartat anterior recull les competències contingudes en el document VERIFICA. En aquesta assignatura s'aborden part dels resultats d'aprenentatge de la matèria QUÍMICA FÍSICA I que permeten adquirir, tant coneixements específics de Química, com habilitats i competències cognitives i competències generals recomanades per l'EUROPEAN CHEMISTRY THEMATIC NETWORK (ECTN) per al *Chemistry Eurobachelor® Label*. A la següent taula es relacionen els resultats d'aprenentatge adquirits en l'assignatura de QUÍMICA FÍSICA I relacionats amb les competències del grau en Química

CONEIXEMENTS ESPECÍFICS DE QUÍMICA	
El procés d'aprenentatge ha de permetre als titulats de grau demostrar:	
	Competències de l'assignatura QUÍMICA FÍSICA I que contemplen els resultats d'aprenentatge EUROBACHELOR®
Les característiques dels diferents estats de la matèria i les teories utilitzades per a descriure'ls.	Demostrar que coneix les característiques i el comportament dels diferents estats de la matèria i les teories usades per descriure'ls.(CE3).
Els principis de la termodinàmica i la seva aplicació a la química.	Demostrar que coneix els principis de termodinàmica i cinètica i les seues aplicacions en química.(CE6).
La cinètica del canvi químic, inclosa la catàlisi; la interpretació mecànica de les reaccions químiques.	Demostrar que coneix els principis de termodinàmica i cinètica i les seues aplicacions en química.(CE6).

COMPETÈNCIES I HABILITATS COGNITIVES**El procés d'aprenentatge ha de permetre als titulats de grau demostrar:**



	Competències de l'assignatura QUÍMICA FÍSICA I que contempen els resultats d'aprenentatge EUROBACHELOR®
Capacitat per a demostrar coneixement i comprensió dels fets, conceptes, principis i teories fonamentals relacionades amb els temes esmentats anteriorment.	Demostrar el coneixement i la comprensió dels fets essencials, dels conceptes, dels principis i de les teories relacionades amb les àrees de la química.(CE13).
Capacitat per a aplicar aquest coneixement i comprensió a la solució de problemes comuns qualitatiu i quantitativ.	Resoldre problemes qualitatiu i quantitativ segons models desenvolupats prèviament.(CE14).
	Reconèixer i analitzar problemes nous i planejar estratègies per solucionar-los.(CE15).
	Comprendre els aspectes qualitatiu i quantitativ dels problemes químics.(CE24).
Competències per a presentar i argumentar temes científics de forma oral i escrita a una audiència especialitzada.	Relacionar la química amb altres disciplines.(CE26).
	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.(CG6).
	Que els estudiants puguen transmetre informació, idees, problemes i solucions a un públic tant especialitzat com no especialitzat.(CB4).
Capacitat per al càlcul i el processament de dades, relacionats amb informació i dades de química.	Resoldre problemes qualitatiu i quantitativ segons models desenvolupats prèviament.(CE14). Reconèixer i analitzar problemes nous i planejar estratègies per solucionar-los.(CE15).



COMPETÈNCIES I HABILITATS RELACIONADES AMB LA PRÀCTICA DE LA QUÍMICA	
El procés d'aprenentatge ha de permetre als titulats de grau demostrar:	
	Competències de l'assignatura QUÍMICA FÍSICA I que contempen els resultats d'aprenentatge EUROBACHELOR®
COMPETÈNCIES GENERALS	
El procés d'aprenentatge ha de permetre als titulats de grau demostrar:	
	Competències de l'assignatura QUÍMICA FÍSICA I que contempen els resultats d'aprenentatge EUROBACHELOR®
Capacitat per a aplicar coneixement pràctic per a la resolució de problemes relacionats amb informació qualitativa i quantitativa.	<p>Resoldre problemes de forma efectiva.(CG4).</p> <p>Resoldre problemes qualitius i quantitius segons models desenvolupats prèviament.(CE14).</p> <p>Relacionar teoria i experimentació.(CE22).</p> <p>Reconèixer i valorar els processos químics en la vida diària.(CE23).</p> <p>Comprendre els aspectes qualitius i quantitius dels problemes químics.(CE24).</p>
Capacitats de càlcul i aritmètiques, incloent aspectes tals com error d'anàlisi, estimacions d'ordres de magnitud, i ús correcte de les unitats.	Desenvolupar capacitat d'anàlisi, síntesi i raonament crític. (CG1).



	<p>Demostrar capacitat inductiva i deductiva.(CG2).</p> <p>Resoldre problemes de forma efectiva.CG4).</p>
Capacitat d'adaptar-se a noves situacions i prendre decisions.	<p>Demostrar capacitat per a adaptar-se a situacions noves.(CG9).</p> <p>Reconèixer i analitzar problemes nous i planejar estratègies per solucionar-los.(CE15).</p> <p>Que els estudiants tinguen la capacitat d'arreplegar 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.(CB3).</p>
Habilitats de planificació i gestió del temps.	<p>Desenvolupar capacitat d'anàlisi, síntesi i raonament crític. (CG1).</p> <p>Resoldre problemes de forma efectiva.CG4).</p>
Competències d'estudi necessàries per al desenvolupament professional. Aquestes inclouran l'habilitat de treballar de forma autònoma.	<p>Demostrar capacitat de treball en equip incloent equips de caràcter interdisciplinari i en un context internacional.(CG5).</p> <p>Aprendre de forma autònoma.(CG8).</p> <p>Demostrar capacitat per a adaptar-se a situacions</p>



	noves.(CG9). Que els estudiants hagen desenvolupat aquelles habilitats d'aprenentatge necessàries per a emprendre estudis posteriors amb un alt grau d'autonomia.(CB5).
Compromís ètic amb el Codi Europeu de conducta: http://ec.europa.eu/research/participants/data/ref/h2020/other/hi/h2020-ethics_code-of-conduct_en.pdf	
	Que els estudiants tinguen la capacitat d'aplegar 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.(CB3).

En relació amb els Objectius de Desenvolupament Sostenible (ODS) en aquesta assignatura s'espera que els/les estudiants/es siguen capaços de saber aplicar els coneixements apresos per contribuir a garantir una educació inclusiva, equitativa i de qualitat i promoure oportunitats d'aprenentatge (ODS 4), així com per un desenvolupament sostenible i compatible amb el medi ambient (ODS 11, 12, 13, 14 i 15).

Al finalitzar l'assignatura de Química Física I el/l'estudianta ha de ser capaç de:

- Obtenir l'orde i la constant de velocitat de reaccions químiques senzilles i complexes a partir de dades experimentals, així com utilitzar distints mètodes per a la seua determinació, incloent els coneixements adquirits en Aplicacions Informàtiques.
- Comprendre les aproximacions de l'etapa limitant i de l'estat estacionari per a 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 a partir d'un diagrama de fases d'una substància pura.
- Utilitzar l'equació de Clapeyron per a deduir una expressió aproximada per a l'equació sòlid-líquid i l'equació de Clausius-Clapeyron (equació fase no condensada-fase condensada) i utilitzar eixa 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.
- Calcular magnituds termodinàmiques de mescla per a dissolucions ideals
- Calcular pressions de vapor utilitzant la llei de Raoult i Henry.
- Calcular la constant de llei d'Henry usant pressions de vapor de dissolucions diluïdes.
- Calcular l'augment del punt d'ebullició i descens del punt de congelació a partir de dades



temperatura- composició.

- Calcular la pressió osmòtica en dissolucions diluïdes ideals.
- Calcular coeficients d'activitat a partir de mesures de pressió de vapor usant els dos convenis (simètric i asimètric).
- Calcular funcions termodinàmiques i d'excés per a dissolucions reals
- Calcular 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'una mescla
- 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 a calcular coeficients d'activitat iònic mitjans (lleis límit i amplada de Debye-Huckel, equació de Davies).
- Calcular la constant d'equilibri i la variació del potencial de Gibbs a partir de la composició d'equilibri.
- Calcular la constant d'equilibri a partir de la variació del potencial de Gibbs .
- Calcular les quantitats de les distintes substàncies presents en un sistema quan este aconseguix l'estat d'equilibri.
- Predir el desplaçament d'un equilibri químic quan se li sotmet a una modificació de les condicions d'equilibri.
- Calcular constants d'equilibri en sistemes no ideals partint de variació del potencial de Gibbs .
- Calcular 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.
- Calcular el potencial estàndard de la reacció de la pila utilitzant la seua relació amb la variació del potencial de Gibbs
- Calcular el potencial estàndard a partir de la taula de potencials normals d'elèctrode
- Calcular el potencial estàndard d'una pila galvànica reversible utilitzant l'equació de Nernst.
- Calcular propietats termodinàmiques de la reacció d'una pila a partir de dades de potencial estàndard enfront de la temperatura.
- Calcular les constants d'equilibri a partir de les dades de potencial estàndard.
- Calcular els 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 (entalpia lliure). Dependència de la funció de Gibbs amb la temperatura. Dependència de la funció de Gibbs amb 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.

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

Potencial químic dels líquids (dissolucions). Dissolucions ideals: llei de Raoult. Propietats termodinàmiques de les dissolucions. Dissolucions ideals diluïdes: llei d'Henry. Propietats termodinàmiques. Propietats col·ligatives. La 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 coeficients 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 coligativas. 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 F.E.M.: 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 entorn a tres eixos: les classes teòric-pràctiques, els seminaris i altres activitats en les hores no presencials. Pel que fa a les primeres, en elles s'oferirà una visió global del tema tractat i s'incidirà en aquells conceptes clau per a la comprensió del mateix. Així mateix, se li indicarà els recursos més recomanables per a la preparació posterior del tema en profunditat.

En algunes sessions presencials se li 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 proposats d'este 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, s'han preparat 7 sessions al llarg del quadrimestre. En elles, 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 rebrà en elles una llista de preguntes i problemes addicionals que li serviran per a reforçar els seus coneixements i exercitar-se en cada un dels aspectes tractats en les sessions de classe. L'alumne haurà d'entregar resolta els problemes i qüestions que el Professor indiqui.

AVALUACIÓ

L'avaluació de l'aprenentatge dels alumnes es durà a terme de dues formes diferents:

1. Avaluació contínua dels progressos i de les activitats exercides al llarg del curs. La nota obtinguda en este apartat constituirà un 30% de la nota final.
2. Un examen final que contribuirà a la nota definitiva en un 70%. L'examen podrà incloure tant qüestions (teòriques i/o numèriques) com a problemes. Es requerirà una qualificació mínima de 4.0 en l'examen final perquè es considere l'avaluació contínua en la qualificació global de l'assignatura

En cas de segona avaluació es mantindran el criteris exposats en la primera.

REFERÈNCIES

Bàsiques

- 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)