

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

Codi	34195
Nom	Química física III
Cicle	Grau
Crèdits ECTS	6.0
Curs acadèmic	2016 - 2017

Titulació/titulacions

Titulació	Centre	Curs	Període
1108 - Grau de Química	Facultat de Química	3	Primer quadrimestre

Matèries

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

Coordinació

Nom	Departament
TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO	315 - Química Física

RESUM

L'assignatura “Química física III” és una assignatura obligatòria que s'imparteix en el cinquè semestre. En el pla d'estudis actualment en vigor consta d'un total de 6.0 crèdits ECTS.

Amb aquesta assignatura es pretén, essencialment, que l'alumne complete i integre la seua formació quimicofísica. En les assignatures de “Química física I i II” l'alumne ha adquirit coneixements de les visions macroscòpiques (fonamentalment termodinàmica) i microscòpiques (quàntica) de la matèria. En aquesta assignatura es pretén iniciar en el caràcter complementari de les dues visions, i mostrar com la termodinàmica estadística permet el càlcul de les propietats macroscòpiques de la matèria a partir de les propietats microscòpiques dels seus constituents. A més d'aquest propòsit fonamental, es pretén formar l'alumne en altres coneixements quimicofísics encara no adquirits, com ara els fenòmens de superfícies i els polímers i completar la formació en espectroscòpia amb un tema dedicat a la ressonància magnètica nuclear.



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

Per tal que es puga abordar amb èxit l'assignatura, és necessari que l'estudiant haja adquirit una sèrie de coneixements previs. Aquests coneixements comprenen:

Maneig de conceptes termodinàmics (energia interna, entropia i energia lliure, espontaneïtat i equilibri) i de cinètica bàsica (mecanisme, etapa lenta, ordre de reacció, equacions integrades).

Maneig de conceptes quàntics, com ara funció d'ona, estats i nivells. Coneixement de les solucions de sistemes model (partícula en la caixa, rotor rígid).

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 qualitatiu i quantitatiu 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 qualitatiu i quantitatiu 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

Objectius Tema 1

- Expressar el moment angular d'espín nuclear a partir de l'espín nuclear.
- Identificar el nombre d'estats nuclears atenent a l'espín nuclear.
- Establir la relació entre el moment angular d'espín nuclear i el moment dipolar magnètic nuclear.
- Calcular l'energia dels estats d'espín nuclear quan el nucli està immers en un camp magnètic.
- Calcular la freqüència de ressonància per a un nucli no apantallat.
- Descriure el fenomen d'apantallament.
- Definir el desplaçament químic.
- Predir la influència de l'acoblament espín-espín en un sistema senzill com per exemple l'AX.

Objectius Tema 2

- Calcular probabilitats d'ocupació d'estats a partir de l'energia i de la temperatura.
- Calcular probabilitats d'ocupació de nivells energètics a partir de l'energia i de la temperatura.
- Calcular funcions de partició moleculars tant com sumes explícites com sota les aproximacions més habituals.
- Interpretar el significat de la funció de partició.
- Calcular, a partir de propietats microscòpiques, l'energia interna, capacitat calorífica, entropia i energia lliure de gasos ideals formats per molècules senzilles (mono, di i triatòmiques).
- Calcular la constant d'equilibri per a reaccions entre gasos ideals formats per molècules senzilles.
- Predir el sentit de l'equilibri i el canvi amb la temperatura a partir de les energies fonamentals de reactius i productes i l'accessibilitat dels estats energètics en aquests.

Objectius Tema 3

- Calcular velocitats característiques d'una mostra de gas en equilibri.



- Calcular la freqüència de col·lisió de les molècules d'un gas entre si i amb les parets del recipient.
- Calcular el recorregut lliure mitjà de les molècules d'un gas.
- Calcular la constant de velocitat per a una reacció entre gasos a partir de la teoria de col·lisions.
- Interpretar la superfície d'energia potencial d'un sistema reactiu. Localitzar els punts estacionaris i classificar-los com espècies estables (reactius, productes, intermedis) o no (estat de transició). Traçar sobre aquestes superfícies els camins de reacció de mínima energia.
- Calcular la constant de velocitat per a una reacció a partir de la teoria de l'estat de transició.
- Utilitzar la formulació termodinàmica de la teoria de l'estat de transició per interpretar la dependència de la constant de velocitat amb la temperatura. Càlcul de l'entalpia, entropia i energia lliure d'activació.

Objectius Tema 4

- Definir el concepte de procés de transport des del punt de vista fenomenològic i macroscòpic i identificar al seu torn quan un sistema es troba o no allunyat del seu estat d'equilibri termodinàmic.
- Explicar i diferenciar els diferents tipus de processos de transport, d'acord amb la magnitud termodinàmica que és transportada.
- Explicar, deduir i aplicar les lleis generals i particulars d'aquests fenòmens del transport per als sistemes corresponents.
- Explicar la llei de Kohlrausch així com la llei de migració independent dels ions en dissolució.
- Descriure i explicar l'evolució d'un sistema en règim no estacionari.
- Deduir i raonar la segona llei de Fick de la difusió.
- Aplicar les solucions de l'equació de difusió a problemes relacionats amb la contaminació del medi ambient, i estudiar el seu caràcter predictiu.
- Relacionar la mobilitat iònica amb la conductivitat dels ions en dissolució, i deduir l'equació de Nernst-Einstein de la difusió dels ions en dissolució.

Objectius Tema 5

- Definir tensió superficial.
- Determinar l'efecte de la tensió superficial en interfases corbes: influència del radi de curvatura, pressió de vapor en variar la curvatura, ascens / descens per un capil·lar.
- Comprendre i explicar la variació de la tensió superficial amb la concentració.



- Distingir entre quimisorció i fisorció.
- Definició i classificació d'isoterma d'adsorció.
- Deduir la isoterma de Langmuir i determinar els paràmetres característics.
- Influència de la temperatura en l'adsorció.
- Variació de la fracció de recobriment amb la pressió en variar la temperatura.
- Isotherma BET. Determinació i interpretació de paràmetres característics.
- Interpretació de les corbes electrocapil·lars.
- Determinar la variació de la tensió superficial, de la densitat de càrrega superficial i de la capacitat amb el potencial aplicat.

Objectius Tema 6

- Entendre el mecanisme general de la catàlisi heterogènia.
- Aplicar els coneixements de cinètica formal a la deducció de la llei cinètica d'alguns processos amb catàlisi heterogènia: mecanismes de Langmuir-Hishelwood i de Rideal-Eley.
- Adquirir una visió general de l'ús de catalitzadors sòlids.
- Entendre les diferències entre processos electròdics faradaics i no faradaics.
- Deduir la funció intensitat-corrent per a alguns processos: transferència d'electrons i processos reversibles controlats per difusió.
- Adquirir una visió elèctrica dels processos electròdics.

Objectius Tema 7

- Definir polímer o macromolècula.
- Conèixer i determinar les mitjanes de masses moleculars característics de sistemes macromoleculars.
- Definir la mida d'un polímer.
- Definir les temperatures característiques d'un polímer.
- Variació de l'estat d'un polímer en funció de la temperatura.



- Estudi termodinàmic d'un polímer en un dissolvent. Determinació de la variació d'energia lliure de mescla.
- Definició de sistemes col·loïdals.
- Classificació de sistemes col·loïdals.
- Determinació de l'estructura i estabilitat de sistemes col·loïdals.
- Estudi dels aspectes cinètics de sistemes col·loïdals.
- Estudi dels aspectes termodinàmics de sistemes col·loïdals.
- Aplicacions pràctiques de sistemes col·loïdals.

DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

1. Ressonància magnètica nuclear

- 1.1. - Presentació:
- 1.2. - Propietats magnètiques dels nuclis atòmics.
 - 1.2.1. - Espín nuclear i moment angular d'espín nuclear.
 - 1.2.2. - Moment dipolar magnètic nuclear: magnetó nuclear, quocient giromagnètic.
- 1.3.-Interacció d'un camp magnètic amb els nuclis atòmics.
 - 1.3.1. - Energia d'interacció del camp magnètic amb el moment magnètic nuclear.
 - 1.3.2. - Precessió i freqüència de Larmor.
 - 1.3.3. - Desdoblament dels nivells d'energia d'espín nuclear.
- 1.4. - Espectroscòpia de RMN.
 - 1.4.1. - Freqüència de ressonància.
 - 1.4.2. - Població dels nivells.
 - 1.4.3. - Regles de selecció.
 - 1.4.4.-Descripció clàssica d'un equip de mesura.
- 1.5.-Desplaçament químic.
 - 1.5.1. - Apantallament i desplaçament químic.
 - 1.5.2. - Escala de desplaçaments químics.
- 1.6.-Estructura fina de l'espectre.
 - 1.6.1. - Sistema AX.
 - 1.6.2. - Sistema A2.
 - 1.6.3. - Sistema AXN.
 - 1.6.4. - Valors de l'acoblament espín-espín.
 - 1.6.5. - Origen de l'acoblament espín-espín en dissolució.



2. Termodinàmica estadística: fonaments i sistemes de partícules independents

1. - Introducció a la termodinàmica estadística
 - 1.1. Origen de la termodinàmica estadística.
 - 1.2. Estats d'un sistema. Relació entre les propietats macroscòpiques i microscòpiques d'un sistema.
2. - Com es calculen les propietats termodinàmiques? El concepte de col·lectiu
 - 2.1. Probabilitat d'un microestat en el col·lectiu canònic.
 - 2.2. Funcions termodinàmiques en el col·lectiu canònic.
 - 2.3. Propietats i interpretació de la funció de partició canònica.
- 3.-Funció de partició en sistemes de partícules no interactuants.
4. - Funció de partició molecular.
5. - Propietats termodinàmiques del gas ideal.
6. - La constant d'equilibri entre gasos ideals.

3. Cinètica molecular

- 3.1. Introducció.
- 3.2. Teoria de col·lisions.
 - 3.2.1. Velocitats moleculars.
 - 3.2.1.1. Funcions de distribució de la velocitat.
 - 3.2.1.2. Obtenció de les funcions de distribució de la velocitat.
 - 3.2.2. Velocitats característiques.
 - 3.2.3. Distribució d'energies.
 - 3.2.4. Col·lisions amb les parets. Efusió.
 - 3.2.5. Col·lisions intermoleculars i recorregut lliure mitjà.
 - 3.2.6. Col·lisions i reactivitat química.
- 3.3. Superfícies d'energia potencial.
- 3.4. Teoria de l'estat de transició.
 - 3.4.1. Hipòtesis bàsiques i desenvolupament.
 - 3.4.2. Formulació termodinàmica de la TET.
 - 3.4.3. Limitacions de la TET.

4. Fenòmens de transport i conductivitat electrolítica

- 4.1. Introducció.
 - 4.1.1. - Descripció macroscòpica d'estats de no equilibri.
 - 4.1.2. - Definició de conceptes bàsics.
 - 4.1.3. - Lleis fenomenològiques.
- 4.2. - Tipus de processos de transport i propietats transportades.
 - 4.2.1. - Conducció tèrmica. Llei de Fourier.
 - 4.2.2. - Viscositat. Llei de Newton. Llei de Poiseuille.
 - 4.2.3. - Difusió. Primera llei de Fick.
 - 4.2.4. - Conducció iònica: conductivitat elèctrica, . Llei d'Ohm. Migració.
- 4.3. - Punt de vista microscòpic. Fenòmens de transport en gas d'esferes rígides.
 - 4.3.1. - Coeficient de conductivitat tèrmic, k .



- 4.3.2. - Coeficient de viscositat, η .
- 4.3.3. - Coeficient de difusió, D .
- 4.4. - Equació general de la difusió.
- 4.4.1. - Segona llei de Fick.
- 4.4.2. - Solucions de l'equació de difusió.
- 4.4.3. - Difusió amb convecció. Equació general de la difusió.
- 4.4.4. - Conductivitat molar. Llei de Kohlrausch. Mobilitat iònica. Equació d'Einstein. Relacions de Nernst-Einstein

5. Fenòmens de superfície

- 5.1. - Interfase líquida.
- 5.1.1. - Tensió superficial.
- 5.1.2. - Interfases corbes.
- 5.1.2.1. - Equació de Young-Laplace.
- 5.1.2.2. - Pressió de vapor en superfícies corbes.
- 5.1.2.3. - Capil·laritat.
- 5.1.3. - Sistemes multicomponents.
- 5.2. - Interfase sòlida.
- 5.2.1. - Fisisorció i quimisorció.
- 5.2.2. - Isotermes d'adsorció.
- 5.2.2.1. - Isoterma de Langmuir.
- 5.2.2.2. - Extensions de la isoterma de Langmuir.
- 5.2.2.3. - Efecte de la temperatura sobre l'equilibri d'adsorció.
- 5.2.2.4. - Limitacions en la isoterma de Langmuir.
- 5.2.3. - Altres isotermes.
- 5.3. - Interfases electritzades.
- 5.3.1. - Estructura de la interfase electritzada.

6. Catàlisi heterogènia i cinètica electròdica

- 6.1. Introducció.
- 6.2. Introducció a la catàlisi.
- 6.2.1. Principis bàsics de la catàlisi.
- 6.2.1.1. Mecanisme general de la catàlisi.
- 6.2.1.2. - Mecanismes tipus de catàlisi heterogènia.
- 6.2.1.3. - Exemples de catàlisi.
- 6.3. Introducció a la cinètica electròdica.
- 6.3.1. La transferència d'electrons.
- 6.3.2. Reacció electroquímica reversible controlada per difusió.
- 6.3.3. Reacció amb equilibri químic previ a la transferència d'electrons.

**7. Introducció als sistemes macromoleculars i col·loïdals**

7.1. Introducció als sistemes macromoleculars.

7.1.1. Introducció.

7.1.2. Distribució de pesos moleculars.

7.1.3. Propietats físiques dels polímers.

7.1.4. Termodinàmica de polímers en dissolució.

7.2. Introducció als sistemes col·loïdals.

7.2.1. Classificació i preparació.

7.2.2. Estructura i estabilitat: aspectes termodinàmics i cinètics.

7.2.3. Aplicacions.

VOLUM DE TREBALL

ACTIVITAT	Hores	% Presencial
Classes de teoria	51,00	100
Tutories reglades	9,00	100
Elaboració de treballs en grup	7,00	0
Elaboració de treballs individuals	7,00	0
Estudi i treball autònom	41,00	0
Preparació de classes de teoria	14,00	0
Preparació de classes pràctiques i de problemes	14,00	0
Resolució de qüestionaris on-line	7,00	0
TOTAL	150,00	

METODOLOGIA DOCENT

El desenvolupament de l'assignatura s'estructura al voltant de tres eixos principals: les sessions de teoria, les tutories i el seminaris.

A les classes de teoria s'explicaran els conceptes fonamentals per a cada un dels temes recollits en el temari, i s'indiquen les fonts bibliogràfiques necessàries perquè l'alumne hi aprofundisca. A més els alumnes disposaran d'apunts realitzats per l'equip de professors que es poden fer servir com a *punt de partida* per al treball de l'estudiant, *mai com a material únic* d'estudi. Una vegada exposats els conceptes teòrics, es realitzaran problemes corresponents al tema.

Pel que fa a les sessions de tutoria, a més dels dubtes presentats pels alumnes, es treballarà sobre qüestions proposades pel professor amb suficient antelació com perquè l'alumne pugui intentar resoldre-les pels seus mitjans i participar-hi d'una forma activa.



A més, està prevista la realització de seminaris per a l'ampliació d'alguns dels aspectes dels temes destacats pel seu interès o actualitat i també per aprofundir-hi.

Seminaris-Conferències: Els Seminaris-Conferències versaran sobre aspectes complementaris de la seva formació en Química Física. Per a aquesta tasca, els estudiants assistiran a l'acte i contestaran un qüestionari preparat pel professor.

AVALUACIÓ

L'avaluació de l'aprenentatge dels estudiants tindrà en compte tots els aspectes exposats en l'apartat de Metodologia d'aquesta guia docent. L'assistència i complementació del qüestionari del Seminari-Conferència tindrà una equivalència d'una tutoria.

L'avaluació de l'assignatura es realitzarà mitjançant dues vies, una de presencial i una altra de no presencial. En principi tots els estudiants i estudiantos romanen assignats a la via presencial. Podran sol·licitar el canvi a la no presencial mitjançant escrit dirigit al professor de l'assignatura en un termini no superior a les 3 setmanes des del principi del curs.

En la via presencial l'examen serà el 70% de la nota final i consistirà en una sèrie de qüestions teòriques i pràctiques (problemes) dividides en diferents apartats. El 30% de la qualificació provindrà d'activitats d'avaluació contínua (lliurables o exàmens parcials) i presencials (participació en tutories i seminaris). La participació de l'estudiant en aquestes activitats és obligatòria. Per aprovar l'assignatura haurà d'obtenir-se una nota total igual o superior a 5. A més a més serà necessari que en cadascun dels apartats considerats en l'avaluació total s'assolisca una nota mínima del 40% del total de l'apartat corresponent.

En la via no presencial la nota final correspon a la de l'examen. Per a aprovar l'assignatura caldrà obtenir una nota total igual o superior a 5.

El sistema d'avaluació serà el mateix en les dues convocatòries. Si és el cas, la nota de l'avaluació contínua es manté per a la segona convocatòria.

REFERÈNCIES

Bàsiques

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



Complementàries

- McQuarrie, D.A. y Simons, J.D., Physical Chemistry. A Molecular Approach. University Science Books, Sausalito. ISBN 9780935702996
- Tuñón, I. y Silla, E., Termodinámica Estadística para Químicos y Bioquímicos, Síntesis, 2008. ISBN 9788497566899