

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

<b>Código</b>	34195
<b>Nombre</b>	Química Física III
<b>Ciclo</b>	Grado
<b>Créditos ECTS</b>	6.0
<b>Curso académico</b>	2017 - 2018

**Titulación(es)**

<b>Titulación</b>	<b>Centro</b>	<b>Curso</b>	<b>Periodo</b>
1108 - Grado de Química	Facultad de Química	3	Primer cuatrimestre

**Materias**

<b>Titulación</b>	<b>Materia</b>	<b>Caracter</b>
1108 - Grado de Química	7 - Química Física	Obligatoria

**Coordinación**

<b>Nombre</b>	<b>Departamento</b>
TUÑÓN GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO	315 - Química Física

**RESUMEN**

La asignatura Química Física III es una asignatura obligatoria que se imparte en el quinto semestre. En el plan de estudios actualmente en vigor consta de un total de 6.0 créditos ECTS.

Con esta asignatura se pretende, esencialmente, que el alumno complete e integre su formación químico física. En las asignaturas de Química Física I y II el alumno ha adquirido conocimientos de las visiones macroscópicas (fundamentalmente Termodinámica) y microscópicas (Cuántica) de la materia. En esta asignatura se pretende iniciar en el carácter complementario de ambas visiones, mostrando como la Termodinámica Estadística permite el cálculo de las propiedades macroscópicas de la materia a partir de las propiedades microscópicas de sus constituyentes. Además de este propósito fundamental, se pretende formar al alumno en otros conocimientos químico físicos todavía no adquiridos, tales como los fenómenos de superficies y los polímeros y completar la formación en espectroscopía con un tema dedicado a la resonancia magnética.



## 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

A fin de poder abordar con éxito la asignatura, es imprescindible que el estudiante posea una serie de conocimientos previos. Dichos conocimientos comprenden:

Manejo de conceptos termodinámicos (energía interna, entropía y energía libre, espontaneidad y equilibrio) y de cinética básica (mecanismo, etapa lenta, orden de reacción, ecuaciones integradas).

Manejo de conceptos cuánticos, tales como función de onda, estados y niveles. Conocimiento de las soluciones de sistemas modelo (partícula en la caj

## 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

### Objetivos Tema 1

- Expresar el momento angular de espín nuclear a partir del espín nuclear.
- Identificar el número de estados nucleares atendiendo al espín nuclear.
- Establecer la relación entre el momento angular de espín nuclear y el momento dipolar magnético nuclear.
- Calcular la energía de los estados de espín nuclear cuando el núcleo está inmerso de un campo magnético
- Calcular la frecuencia de resonancia para un núcleo no apantallado.
- Describir el fenómeno de apantallamiento.
- Definir el desplazamiento químico.
- Predecir la influencia del acoplamiento espín-espín en un sistema sencillo como el AX.

### Objetivos Tema 2

- Calcular probabilidades de ocupación de estados a partir de la energía y la temperatura.
- Calcular probabilidades de ocupación de niveles energéticos a partir de la energía y la temperatura.
- Calcular funciones de partición moleculares tanto como sumas explícitas como bajo las aproximaciones más habituales.
- Interpretar el significado de la función de partición
- Calcular, a partir de propiedades microscópicas, la energía interna, capacidad calorífica, entropía y energía libre de gases ideales formados por moléculas sencillas (mono, di y triatómicas).
- Calcular la constante de equilibrio para reacciones entre gases ideales formados por moléculas sencillas.
- Predecir el sentido del equilibrio y su cambio con la temperatura a partir de las energías fundamentales de reactivos y productos y la accesibilidad de los estados energéticos en ellos.

### Objetivos Tema 3

- Calcular velocidades características de una muestra de gas en equilibrio.



- Calcular la frecuencia de colisión de las moléculas de un gas entre sí y con las paredes del recipiente.
- Calcular el recorrido libre medio de las moléculas de un gas.
- Calcular la constante de velocidad para una reacción entre gases a partir de la teoría de colisiones.
- Interpretar la superficie de energía potencial de un sistema reactivo. Localizar los puntos estacionarios y clasificarlos como especies estables (reactivos, productos, intermedios) o no (estado de transición). Trazar sobre estas superficies los caminos de reacción de mínima energía.
- Calcular la constante de velocidad para una reacción a partir de la teoría del estado de transición.
- Utilizar la formulación termodinámica de la teoría del estado de transición para interpretar la dependencia de la constante de velocidad con la temperatura. Cálculo de la entalpía, entropía y energía libre de activación.

#### Objetivos Tema 4

- Definir el concepto de *proceso de transporte* desde el punto de vista fenomenológico y macroscópico identificando a su vez cuándo un sistema se halla o no alejado de su estado de equilibrio termodinámico.
- Explicar y diferenciar los distintos tipos de procesos de transporte, en base a la magnitud termodinámica que es transportada.
- Explicar, deducir y aplicar las leyes generales y particulares de dichos fenómenos del transporte para los sistemas correspondientes.
- Explicar la ley de Kohlrausch así como la ley de migración independiente de los iones en disolución.
- Describir y explicar la evolución de un sistema en régimen no estacionario.
- Deducir y razonar la segunda ley de Fick de la Difusión.
- Aplicar las soluciones de la ecuación de difusión a problemas relacionados con la contaminación del medioambiente, y estudiar su carácter predictivo.
- Relacionar la movilidad iónica con la conductividad de los iones en disolución, deduciendo la ecuación de Nernst-Einstein de la difusión de los iones en disolución.

#### Objetivos Tema 5

- definir tensión superficial.
- determinar el efecto de la tensión superficial en interfases curvas: influencia del radio de curvatura, presión de vapor al variar la curvatura, ascenso/descenso por un capilar.
- entender la variación de la tensión superficial con la concentración.
- distinguir entre quimisorción y fisorción.



- definición y clasificación de isoterma de adsorción.
- deducir la isoterma de Langmuir y determinar los parámetros característicos.
- influencia de la temperatura en la adsorción.
- variación de la fracción de recubrimiento con la presión al variar la temperatura.
- Isoterma BET. Determinación e interpretación de parámetros característicos.
- Interpretación de las curvas electrocapilares.
- Determinar la variación de la tensión superficial, de la densidad de carga superficial y de la capacidad con el potencial aplicado.

### Objetivos Tema 6

- Entender el mecanismo general de la catálisis heterogénea
- Aplicar los conocimientos de Cinética Formal a la deducción de la ley cinética de algunos procesos con catálisis heterogénea: Mecanismos de Langmuir-Hishelwood y de Rideal-Eley.
- Adquirir una visión general del uso de catalizadores sólidos.
- Entender las diferencias entre procesos electroquímicos faradaicos y no faradaicos.
- Deducir la función intensidad-corriente para algunos procesos: Transferencia de electrones y procesos reversibles controlados por difusión.
- Adquirir una visión eléctrica de los procesos electroquímicos.

### Objetivos Tema 7

- definir polímero o macromolécula.
- conocer y determinar los promedios de masas moleculares característicos de sistemas macromoleculares.
- definir el tamaño de un polímero.
- definir las temperaturas características de un polímero.
- variación del estado de un polímero en función de la temperatura.
- estudio termodinámico de un polímero en un disolvente. Determinación de la variación de energía libre de mezcla.
- definición de sistemas coloidales.



- clasificación de sistemas coloidales.
- determinación de la estructura y estabilidad de sistemas coloidales.
- estudio de los aspectos cinéticos de sistemas coloidales.
- estudio de los aspectos termodinámicos de sistemas coloidales.
- aplicaciones prácticas de sistemas coloidales.

## DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS

### 1. Resonancia Magnética Nuclear

- 1.1.- Presentación
- 1.2.- Propiedades magnéticas de los núcleos atómicos.
  - 1.2.1.- Espín nuclear y momento angular de espín nuclear.
  - 1.2.2.- Momento dipolar magnético nuclear: Magnetón nuclear, cociente giro-magnético.
- 1.3.- Interacción de un campo magnético con los núcleos atómicos.
  - 1.3.1.- Energía de interacción del campo magnético con el momento magnético nuclear.
  - 1.3.2.- Precesión y frecuencia de Larmor.
  - 1.3.3.- Desdoblamiento de los niveles de energía de espín nuclear
- 1.4.- Espectroscopia de RMN
  - 1.4.1.- Frecuencia de resonancia.
  - 1.4.2.- Población de los niveles.
  - 1.4.3.- Reglas de selección.
  - 1.4.4.- Descripción clásica de un equipo de medida.
- 1.5.- Desplazamiento Químico.
  - 1.5.1.- Apantallamiento y desplazamiento químico
  - 1.5.2.- Escala de desplazamientos químicos
- 1.6.- Estructura fina del espectro
  - 1.6.1.- Sistema AX
  - 1.6.2.- Sistema A2
  - 1.6.3.- Sistema AXN
  - 1.6.4.- Valores del acoplamiento espín-espín
  - 1.6.5.- Origen del acoplamiento espín-espín en disolución

### 2. Termodinámica Estadística: Fundamentos y Sistemas de Partículas Independientes

- 1.- Introducción a la Termodinámica Estadística
  - 1.1. Origen de la Termodinámica Estadística
  - 1.2. Estados de un Sistema. Relación entre las Propiedades Macroscópicas y Microscópicas de un Sistema.
- 2.- ¿Cómo se calculan las propiedades termodinámicas? El concepto de colectivo
  - 2.1. Probabilidad de un Microestado en el Colectivo Canónico
  - 2.2. Funciones Termodinámicas en el Colectivo canónico.



- 2.3. Propiedades e interpretación de la Función de partición canónica.
- 3.-Función de Partición en Sistemas de Partículas no Interactuantes.
- 4.- Función de Partición Molecular.
- 5.- Propiedades Termodinámicas del Gas Ideal.
- 6.- La constante de equilibrio entre gases ideales.

### 3. Cinética Molecular

- 3.1. Introducción
- 3.2. Teoría de Colisiones
  - 3.2.1. Velocidades Moleculares
    - 3.2.1.1. Funciones de distribución de la velocidad
    - 3.2.1.2. Obtención de las funciones de distribución de la velocidad
  - 3.2.2. Velocidades Características
  - 3.2.3. Distribución de Energías
  - 3.2.4. Colisiones con las Paredes. Efusión
  - 3.2.5. Colisiones Intermoleculares y recorrido libre medio
  - 3.2.6. Colisiones y Reactividad Química
- 3.3. Superficies de Energía Potencial
- 3.4. Teoría del Estado de Transición
  - 3.4.1. Hipótesis básicas y desarrollo
  - 3.4.2. Formulación termodinámica de la TET
  - 3.4.3. Limitaciones de la TET

### 4. Fenómenos de Transporte y Conductividad Electrolítica

- 4.1.- Introducción
  - 4.1.1.- Descripción macroscópica de estados de no equilibrio.
  - 4.1.2.- Definición de conceptos básicos.
  - 4.1.3.- Leyes fenomenológicas.
- 4.2.- Tipos de procesos de transporte y propiedades transportadas.
  - 4.2.1.- Conducción térmica . Ley de Fourier.
  - 4.2.2.- Viscosidad. Ley de Newton. Ley de Poiseuille.
  - 4.2.3.- Difusión. Primera ley de Fick.
  - 4.2.4.- Conducción iónica: Conductividad eléctrica, . Ley de Ohm. Migración.
- 4.3.- Punto de vista microscópico. Fenómenos de transporte en gas de esferas rígidas.
  - 4.3.1.- Coeficiente de conductividad térmico,  $k$ .
  - 4.3.2.- Coeficiente de viscosidad,  $\eta$ .
  - 4.3.3.- Coeficiente de difusión,  $D$ .
- 4.4.- Ecuación general de la difusión.
  - 4.4.1.- Segunda ley de Fick.
  - 4.4.2.- Soluciones de la ecuación de difusión.
  - 4.4.3.- Difusión con convección. Ecuación general de la difusión
  - 4.4.4.- Conductividad molar. Ley de Kohlrausch. Movilidad iónica. Ecuación de Einstein. Relaciones de Nernst-Einstein.



## 5. Fenómenos de Superficie

- 5.1.- Interfase líquida
  - 5.1.1.- Tensión superficial
  - 5.1.2.- Interfases curvas
    - 5.1.2.1.- Ecuación de Young-Laplace
    - 5.1.2.2.- Presión de vapor en superficies curvas
    - 5.1.2.3.- Capilaridad
  - 5.1.3.- Sistemas multicomponentes
- 5.2.- Interfase sólida
  - 5.2.1.- Fisorción y quimisorción
  - 5.2.2.- Isotermas de adsorción
    - 5.2.2.1.- Isoterma de Langmuir
    - 5.2.2.2.- Extensiones de la Isoterma de Langmuir
    - 5.2.2.3.- Efecto de la temperatura sobre el equilibrio de adsorción
    - 5.2.2.4.- Limitaciones en la isoterma de Langmuir
  - 5.2.3.- Otras isotermas
- 5.3.- Interfases electrizadas
  - 5.3.1.- Estructura de la interfase electrizada

## 6. Catálisis Heterogénea y Cinética Electrónica

- 6.1. Introducción
- 6.2.- Introducción a la Catálisis
  - 6.2.1.- Principios básicos de la Catálisis
    - 6.2.1.1. Mecanismo general de la Catálisis
    - 6.2.1.2.- Mecanismos tipo de catálisis heterogénea
    - 6.2.1.3.- Ejemplos de catálisis
- 6.3. Introducción a la Cinética Electrónica
  - 6.3.1. La transferencia de electrones
  - 6.3.2. Reacción electroquímica reversible controlada por difusión
  - 6.3.3. Reacción con equilibrio químico previo a la transferencia de electrones

## 7. Introducción a los sistemas Macromoleculares y Coloidales.

- 7.1. Introducció als sistemes Macromoleculares.
  - 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.



## VOLUMEN DE TRABAJO

ACTIVIDAD	Horas	% Presencial
Clases de teoría	51,00	100
Tutorías regladas	9,00	100
Elaboración de trabajos en grupo	7,00	0
Elaboración de trabajos individuales	7,00	0
Estudio y trabajo autónomo	41,00	0
Preparación de clases de teoría	14,00	0
Preparación de clases prácticas y de problemas	14,00	0
Resolución de cuestionarios on-line	7,00	0
<b>TOTAL</b>	<b>150,00</b>	

## METODOLOGÍA DOCENTE

El desarrollo de la asignatura se estructura en torno a tres ejes principales: las sesiones de teorías, las tutorías y lo seminarios.

En las clases de teoría se explicarán los conceptos fundamentales para cada uno de los temas recogidos en el temario, indicando las fuentes bibliográficas necesarias para la profundización del alumno. Además los alumnos dispondrán de apuntes realizados por el equipo de profesores que pueden servir como *punto de partida* para el trabajo del alumno, *nunca como material único* de estudio. Tras exponer los conceptos teóricos se realizarán problemas correspondientes al tema.

Por lo que respecta a las sesiones de tutoría, además de las dudas presentadas por los alumnos, se trabajará sobre cuestiones y problemas propuestas por el profesor con suficiente antelación como para que el alumno pueda intentar resolverlas por sus medios y participar de una forma activa.

Además, está prevista la realización de seminarios para la ampliación y profundización en algunos de los aspectos de los temas destacados por su interés o actualidad.

Seminarios-Conferencias: Los Seminarios-Conferencias versaran sobre aspectos complementarios de su formación en Química Física. Para esta tarea, los estudiantes asistirán al acto y contestarán a un cuestionario preparado por el profesor.

## EVALUACIÓN

La evaluación del aprendizaje de los estudiantes tendrá en cuenta todos los aspectos expuestos en el apartado de metodología de esta guía docente. La asistencia y contestación del cuestionario relativo al Seminario-Conferencia tendrá una equivalencia de una tutoría.



La evaluación de la asignatura se realizará a través de dos vías, una presencial y otra no presencial. En principio todos los alumnos quedan asignados a la vía presencial. Podrán solicitar el cambio a la no presencial mediante escrito al profesor de la asignatura en un plazo no superior a las 3 semanas desde el principio del curso.

En la vía presencial el examen será el 70% de la nota final y consistirá en una serie de cuestiones teóricas y prácticas (problemas) divididas en varios apartados. El 30% de la calificación provendrá de actividades de evaluación continua (entregables o exámenes parciales) y presenciales (participación en tutorías y seminarios). La participación del alumno en estas actividades es obligatoria. Para aprobar la asignatura deberá obtenerse una nota total igual o superior a 5. 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 la vía no presencial la nota final corresponde a la del examen. Para aprobar la asignatura deberá obtenerse una nota total igual o superior a 5.

El sistema de evaluación será el mismo en las dos convocatorias. En su caso, la nota de la evaluación continua se mantiene para la segunda convocatoria.

## REFERENCIAS

### Básicas

- Levine, I. N., Físicoquímica. 5ª edición. 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

### Complementarias

- 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