

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

Codi	34195
Nom	Química física III
Cicle	Grau
Crèdits ECTS	6.0
Curs acadèmic	2018 - 2019

Titulació/titulacions

Titulació	Centre	Curs	Període
1110 - Grau de Química V2-2018	Facultat de Química	3	Segon quadrimestre

Matèries

Titulació	Matèria	Caràcter
1110 - Grau de Química V2-2018	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 sisè 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 l'alumne en el caràcter complementari de les dues visions, mostrant 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

1108 - Grau de Química V1-2009 :

1110 - Grau de Química V2-2018 :

1934 - Programa de doble Grau Química-Enginyeria Química_2023 :

R4-OBLIGACIÓ D'HAYER SUPERAT PRÈVIAMENT L'ASSIGNATURA

34183 - Química general I

34184 - Química general II

R5-OBLIGACIÓ DE CURSAR SIMULTÀNIAMENT L'ASSIGNATURA

34194 - Química física II

R4-OBLIGACIÓ D'HAYER SUPERAT PRÈVIAMENT L'ASSIGNATURA

34183 - Química general I

34184 - Química general II

R5-OBLIGACIÓ DE CURSAR SIMULTÀNIAMENT L'ASSIGNATURA

34194 - Química física II

R4-OBLIGACIÓ D'HAYER SUPERAT PRÈVIAMENT L'ASSIGNATURA

34183 - Química general I

34184 - Química general II

R5-OBLIGACIÓ DE CURSAR SIMULTÀNIAMENT L'ASSIGNATURA

34194 - Química física II

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 són:

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 la funció d'ona, estats i nivells. Coneixement de les solucions de sistemes model (partícula en la caps, rotor rígid...)

Càlcul bàsic de derivades i integrals.

Maneig dels diferents sistemes d'unitats.



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 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.
- Aprendre de forma autònoma.
- Demostrar que coneix els aspectes principals de terminologia química, nomenclatura, convenis i unitats.
- 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 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.
- 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

Tema 1

- Expressar el moment angular de spin nuclear a partir de l'spin nuclear.
- Identificar el nombre d'estats nuclears atenent l'spin nuclear.
- Establir la relació entre el moment angular de spin nuclear i el moment dipolar magnètic nuclear.
- Calcular l'energia dels estats de spin nuclear quan el nucli està immers d'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 spin-spin en un sistema senzill, com per exemple l'AX.
- Determinar estructures a partir del seu espectre de RMN usant el programa ChemOffice

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 a 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, la capacitat calorífica, l'entropia i l'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 seu canvi amb la temperatura a partir de les energies fonamentals de reactius i productes i llur accessibilitat dels estats energètics.

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 a 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 a interpretar la dependència de la constant de velocitat amb la temperatura. Càlcul de l'entalpia, l'entropia i l'energia lliure d'activació.



Tema 4

- Definir el concepte de procés de transport des del punt de vista fenomenològic i macroscòpic i identificar quan un sistema es troba o no allunyat del seu estat de 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 de transport per als sistemes corresponents.
- Explicar la llei de Kohlrausch i 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, deduint l'equació de Nernst-Einstein de la difusió dels ions en dissolució.

Tema 5

- Definir tensió superficial.
- Determinar l'efecte de la tensió superficial en interfícies corbes: influència del radi de curvatura, pressió de vapor en variar la curvatura, ascens/descens per un capil·lar.
- Explicar la variació de la tensió superficial amb la concentració.
- Distingir entre quimisorció i fisorció.
- Definir i classificar les isoterms d'adsorció.
- Deduir la isoterma de Langmuir i determinar-ne els paràmetres característics.
- Explicar la influència de la temperatura en l'adsorció.
- Calcular la variació de la fracció de recobriment amb la pressió en variar la temperatura.
- Determinar i interpretar els paràmetres característics de la isoterma de BET.
- Interpretar corbes electrocapilars.



- Determinar la variació de la tensió superficial, de la densitat de càrrega superficial i de la capacitat amb el potencial aplicat.

Tema 6

- Explicar 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.
- Explicar de manera general l'ús de catalitzadors sòlids.
- Enumerar 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.
- Donar una visió electroquímica dels processos electròdics.

Tema 7

- Definir polímer o macromolècula.
- Determinar les mitjanes de masses moleculars característics de sistemes macromoleculars.
- Definir la mida d'un polímer.
- Definir les temperatures característiques d'un polímer.
- Explicar la variació de l'estat d'un polímer en funció de la temperatura.
- Explicar els aspectes termodinàmic d'un polímer en un dissolvent. Determinar la variació d'energia lliure de mescla.
- Definir els sistemes col·loïdals.
- Classificar els sistemes col·loïdals.
- Determinar l'estructura i l'estabilitat de sistemes col·loïdals.
- Explicar els aspectes cinètics de sistemes col·loïdals.
- Explicar els aspectes termodinàmics de sistemes col·loïdals.
- Citar aplicacions pràctiques de sistemes col·loïdals.



I finalment,

- Demostrar una conducta ètica i responsable en l'exercici del seu treball professional, valors que són transmesos pels docents i investigadors de la Universitat, com a generadora i transmissora del coneixement científic.

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. - Fisorció 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 teories, 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, tot i indicant les fonts bibliogràfiques necessàries per a l'aprofundiment de l'alumne. 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'alumne, 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 presentades pels alumnes, es treballarà sobre qüestions proposades pel professor amb suficient antelació com per a que l'alumne pugui intentar resoldre pels seus mitjans i participar d'una forma activa.

A més, està prevista la realització de seminaris per a l'ampliació i aprofundiment en alguns dels aspectes dels temes destacats pel seu interès o actualitat. Els seminaris-conferències versaran sobre aspectes complementaris de la seua 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'assignatura es realitzarà mitjançant dues vies, una de presencial i una altra de no presencial. En principi tot l'alumnat roman assignat a la via presencial. Tanmateix, podrà sol·licitar el canvi a la via no presencial mitjançant un escrit dirigit al professor o a la professora de l'assignatura en un termini no superior a les 3 setmanes des del principi del curs. En la via no presencial la nota final correspon a la de l'examen.



L'avaluació presencial de l'assignatura es realitzarà mitjançant la realització d'un examen final i a les activitats d'avaluació contínua. L'examen serà el 70% de la nota final i consistirà en una sèrie de qüestions teòriques i pràctiques (problemes) dividides en diversos apartats. El 30% de la qualificació provindrà d'activitats d'avaluació contínua (lliurables o exàmens parcials) i presencials (participació en tutories i seminaris). Per aprovar l'assignatura s'haurà d'obtenir una nota total igual o superior a 5. A més serà necessari que en cada un dels apartats considerats en l'avaluació total s'assolesca una nota mínima del 40% del total de l'apartat corresponent.

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 al Seminari-Conferència i l'emplenament del qüestionari corresponent tindran una equivalència d'una tutoria.

REFERÈNCIES

Bàsiques

- LEVINE, I. N., Fisicoquímica. 5ª edición. McGraw Hill, 2004. ISBN 9788448137861 (v. 1) ISBN 9788448137878 (v. 2)
- ATKINS, P., DE PAULA, J. Química Física. 8ª edición. Editorial Médica Panamericana, 2008. ISBN 9789500612487
- ENGEL, T., REID, P. Química Física. Pearson Addison Wesley 2006. ISBN 9788478290772

Complementàries

- McQUARRIE, D.A., SIMONS, J.D., Physical Chemistry. A Molecular Approach. University Science Books, Sausalito. ISBN 9780935702996
- TUÑÓN, I., SILLA, E., Termodinámica Estadística para Químicos y Bioquímicos, Síntesis, 2008. ISBN 9788497566899