

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

Código	44604
Nombre	Química física avanzada
Ciclo	Máster
Créditos ECTS	5.0
Curso académico	2021 - 2022

Titulación(es)

Titulación	Centro	Curso	Periodo
2218 - M.U. en Química	Facultad de Química	1	Primer cuatrimestre

Materias

Titulación	Materia	Caracter
2218 - M.U. en Química	1 - Química avanzada	Obligatoria

Coordinación

Nombre	Departamento
PEREZ PLA, FRANCISCO	315 - Química Física

RESUMEN

La asignatura de Química Física avanzada forma parte de la materia de Química avanzada y tiene como objetivo ampliar y complementar los conocimientos de Química Física adquiridos en el grado. En concreto, la asignatura profundiza en los conocimientos de Espectroscopía Molecular e introduce las nociones básicas de Fotoquímica (no estudiadas en el grado). La asignatura también profundiza el estudio termodinámico de los sistemas reales y permite una comprensión profunda de estos sistemas, mediante la ampliación de los conocimientos de Termodinámica Estadística de sistemas que presentan interacciones intermoleculares. En esta línea, se amplían los conocimientos de Cinética Química vistos durante el grado, extendiéndolos a reacciones complejas, e introduciendo los conceptos fundamentales de catálisis homogénea, heterogénea y biocatálisis. Por último, se amplían los conocimientos básicos de Electroquímica, describiendo los procesos que tienen lugar sobre los electrodos, en concreto la cinética de los procesos que ocurren sobre los mismos, y se aplican los conocimientos adquiridos al estudio del problema de la corrosión electroquímica.



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

Se requieren los conocimientos previos sobre química que se imparten en las titulaciones indicadas en el perfil de ingreso recomendado para el estudiante de Master.

COMPETENCIAS

2218 - M.U. en Química

- Que los/las estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.
- Que los/las estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios.
- Que los/las estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades.
- Ser capaz de resolver problemas complejos de química, sea en el ámbito académico, de la investigación o de la aplicación industrial a nivel de especialización o máster
- Fomentar, en contextos académicos y profesionales del ámbito de la política económica, el avance tecnológico, social o cultural dentro de una sociedad basada en el conocimiento y en el respeto a: a) los derechos fundamentales y de igualdad de oportunidades entre hombres y mujeres, b) los principios de igualdad de oportunidades y accesibilidad universal de las personas con discapacidad y c) los valores propios de una cultura de paz y valores democrático.
- Ser capaces de diseñar, realizar, analizar e interpretar experiencias y datos complejos en el entorno de la química a nivel de especialización.
- Adquirir conocimientos avanzados que permitan valorar la importancia de la química en la salud, el medio ambiente, nuevos materiales y energía.

RESULTADOS DE APRENDIZAJE

(1) Conocer los fundamentos físicos de las diferentes tipos de espectroscopias moleculares y de las técnicas que se derivan de ellas y de los procesos fotofísicos y fotoquímicos.



- (2) Saber relacionar las interacciones intermoleculares y la descripción de los diferentes modelos de sistemas reales (gases, líquidos, disoluciones electrolíticas y no electrolíticas) y utilizar los conceptos de fugacidad y actividad, de funciones de distribución radial, propiedades molares parciales y funciones de exceso.
- (3) Conocer los conceptos de la termodinámica estadística, para sistemas de partículas independientes y teniendo en cuenta las interacciones intermoleculares, y su aplicación a la obtención de las funciones de estado de los gases reales, los líquidos y al comportamiento de los sólidos.
- (4) Saber obtener los datos cinéticos relevantes de reacciones químicas, a partir de mecanismos propuestos y conocer los conceptos básicos de la catálisis homogénea, heterogénea y la biocatálisis.
- (5) Conocer los fundamentos de la cinética electroquímica y su aplicación al estudio y la inhibición de la corrosión.

DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS

1. Espectroscopia molecular y fotoquímica

Aspectos generales de la interacción entre la luz y la materia. Modelos de radiación electromagnética. Radiación y materia: Absorción, Emisión, Dispersión, Difusión y Técnicas espectroscópicas relacionadas. Reglas de selección. La señal espectroscópica: posición, anchura, intensidad. Emisión Laser. Coeficientes de absorción.

Espectroscopia de Resonancia Magnética Nuclear. Aspectos básicos de la técnica de RMN en Química. Factores que determinan la posición de las bandas en RMN. Técnicas de pulsos (RMN-TF). Decaimiento libre de la inducción ("FID"). Relajación de spin: Tiempo de relajación longitudinal y transversal.

Espectroscopías electrónicas de absorción y emisión. Aspectos básicos de la estructura de los espectros electrónicos en moléculas diatómicas. Estructura vibracional y Principio de Franck-Condon. Diferentes tipos de transiciones en moléculas poliatómicas. Fotofísica y Fotoquímica: transiciones radiativas y no radiativas. Espectroscopías de emisión: Fluorescencia y fosforescencia.

2. Termodinámica estadística de sistemas con interacciones

Interacciones intermoleculares: Desarrollos multipolares; fuerzas atractivas; fuerzas repulsivas; modelos de interacciones intermoleculares y sus limitaciones

Termodinámica estadística de sistemas reales y fases condensadas: Función de Partición de Sistemas Reales y Propiedades Termodinámicas; Aplicación de la Termodinámica Estadística a los Gases Reales; Capacidad Calorífica de los Sólidos Cristalinos; Función de distribución radial y estructura de los líquidos

Métodos de simulación: Campos de fuerza; Estrategias de simulación de sistemas realistas; Dinámica Molecular; Método Monte Carlo.



3. Cinética Química de reacciones complejas

Mecanismo y ley de velocidad: Repaso de conceptos básicos. Reacciones complejas. Mecanismo y ley de velocidad. Simplificación de la ley de velocidad. Ecuaciones lineales estacionarias.

Detección de intermedios de reacción: Productos intermedios y centros de reacción. Técnicas de detección y caracterización de productos intermedios. La técnica de flujo-detenido. Otras técnicas (SF-EXAFS, MS-ESI).

Análisis de datos en Cinética Química I: Seguimiento de propiedades físicas. Análisis de reacciones que siguen formalmente un orden. Análisis general de reacciones simples.

Análisis de datos en Cinética Química II: Modelo de respuesta. Respuestas bidimensionales. Factorización de respuestas multicanal. Modelo químico. Sistemas de ecuaciones diferenciales y algebraico-diferenciales. Integración del modelo. Sistemas rígidos (stiff). Técnica de mínimos cuadrados. Funciones objetivo. Minimización de la función objetivo.

4. Procesos electroquímicos y Corrosión

Electroquímica Molecular y de Materiales

Visión general de la Electroquímica. Tipos de electrodos. Perturbación y respuesta eléctrica en celdas. Procesos electroquímicos. La región interfacial electrodo/disolución. Escalas de potencial y unidades de magnitudes electroquímicas.

Irreversibilidad en Celdas Electroquímicas

Procesos electroquímicos faradaicos y no faradaicos. Transporte en celdas electroquímicas. Procesos nerstianos controlados por difusión. El coeficiente de transferencia electrónica y el parámetro de simetría.

Simulación y Tratamiento de Datos en Procesos Electroquímicos.

Curvas intensidad-potencial. Voltamperometría de films electroactivos. Electrosíntesis y caracterización de polímeros conductores. Electrodepósitos metálicos y electrodisoluciones. Circuitos eléctricos equivalentes. Simulación y ajuste multiparámetrica de la respuesta electroquímica.

Corrosión Metálica y su Inhibición

El fenómeno de la Corrosión. Tipos de corrosión. Técnicas experimentales para la medida de la velocidad de corrosión. Predicción de la corrosión de materiales tecnológicos. Métodos para la inhibición de la corrosión.

5. Catálisis

Conceptos básicos. Interacción catalizador/substrato. Principio de Sabatier. Desactivación del catalizador: sinterizado y degradación térmica.

Catálisis homogénea. Catálisis por complejos metálicos. Catálisis ácido-base. Organocatálisis. Recuperación y reciclado del catalizador homogéneo. Catálisis híbrida. «Click Chemistry». Biocatálisis.

Catálisis heterogénea. Etapas del proceso catalítico. Cinéticas Langmuir-Hinshelwood. Catálisis sólido-gas. Tipos de catalizadores sólidos. Caracterización de los catalizadores. Sistemas catalíticos líquido/sólido y líquido/líquido. Catalizadores de transferencia de fase.

**VOLUMEN DE TRABAJO**

ACTIVIDAD	Horas	% Presencial
Clases de teoría	40,00	100
Tutorías regladas	5,00	100
Seminarios	5,00	100
Elaboración de trabajos individuales	15,00	0
Estudio y trabajo autónomo	30,00	0
Lecturas de material complementario	10,00	0
Preparación de actividades de evaluación	20,00	0
TOTAL	125,00	

METODOLOGÍA DOCENTE

La asignatura se impartirá a través de lecciones magistrales participativas, seminarios en donde se realizarán, entre otras actividades formativas, problemas prácticos aplicados, y clases tutorizadas orientadas a evaluar la comprensión de la asignatura por parte del alumno.

EVALUACIÓN**Primera convocatoria:**

La calificación de la asignatura, en primera convocatoria, se obtendrá de las calificaciones obtenidas del examen final, las actividades de evaluación continua realizadas y los trabajos presentados a lo largo del curso. Examen, trabajos y actividades se promediarán de acuerdo con los siguientes porcentajes:

- (a) Examen final: 60%.
- (b) Actividades de evaluación continua (b.1+b.2): 40%.
 - (b.1) Actividades realizadas a lo largo del curso: 20 %.
 - (b.2) Trabajos realizados a lo largo del curso: 20%.

Segunda convocatoria:

La calificación de la asignatura, en segunda convocatoria, se obtendrá de las calificaciones obtenidas del examen de segunda convocatoria y los trabajos presentados a lo largo del curso. Examen y trabajos se promediarán de acuerdo con los siguientes porcentajes:

- (a) Examen final: 80%.



(b) Trabajos realizados a lo largo del curso: 20%.

REFERENCIAS

Básicas

- ATKINS, P. W. Química Física, 6a ed. Ed. Omega, 1999. ISBN 8428211817
- ATKINS, P i DE PAULA, J. Química Física. 8a edició. Editorial Médica Panamericana, 2008. ISBN 9789500612487
- BANWELL, C. N. i McCASH, E.M. Fundamentals of Molecular Spectroscopy, 4a ed., McGraw-Hill, 1994. ISBN 9780077079765
- HORE, P. J. Nuclear Magnetic Resonance. Sèrie Oxford Chemistry Primers. Oxford University Press. Oxford. 1995 . ISBN 0198556829
- LEVINE, I. N. Physical Chemistry [6th edition], Mc Graw-Hill, Dubuque, IA, 2009
- CASTELLÁN, G. W. Físicoquímica, [2a ed., trad. M. Costas Basín i C. Amador Bedolla], Addison-Wesley, 1990.
- DÍAZ PEÑA, M. i MUNTANER, R. Química Física, [tom II], Alhambra, Madrid, 1975
- BERTÁN, J. i NÚÑEZ, J. (coords.) Química Física, Ariel, Barcelona 2002
- Mc.QUARRIE, D. A. Statistical Mechanics, University Science Books, Sausalito, 2000
- TUÑÓN, I. i SILLA, E. Química Molecular Estadística, Síntesis, Madrid, 2008
- STONE, A. The Theory of Intermolecular Forces, Oxford University Press, 2013
- ROTHENBERG, G. Catalysis. Concepts and Green Applications. Wiley-VCH, Weinheim. 2008
- PILLING, M. J. i SEAKINS, P. W. Reaction Kinetics, Oxford Science Publications, Oxford University Press, Oxford, 1999
- BARD, A.J. ; FAULKNER, L.R. Electrochemical Methods. Fundamentals and Applications. John Wiley & Sons, Inc. New York, 2001.
- MASEL, R.I. Chemical Kinetics and Catalysis. Wiley-Interscience, 2001.

Complementarias

- A. REQUENA, A. i ZÚÑIGA, J. Espectroscopia, Pearson Prentice Hall, Madrid, 2003. ISBN 8420536776
- PLANELLES, J., CLEMENTE, I. i GABRIEL, J. Espectroscòpia, Publicacions de la Universitat Jaume I. Castelló, 2002. ISBN 9788480213936
- HOLLAS, J. M. Modern Spectroscopy, 2a ed., John Wiley & Sons, 1992. ISBN 0471930776



- HARRIS, R. K. Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy. A Physico-chemical view, Pitman. Londres. 1983. ISBN 0273016849
- LEVINE, I. N. Espectroscopia Molecular, AC, 1980. ISBN 8472880389
- GRAYBEAL, J. D. Molecular Spectroscopy, McGraw-Hill, 1988
- BOCKRIS, J. O'M., REDDY, A., GAMBOA-ALDECO, M.E., Modern Electrochemistry 2A, Fundamentals of Electrodeics. Springer-Verlag US, 2000.

ADENDA COVID-19

Esta adenda solo se activará si la situación sanitaria lo requiere y previo acuerdo del Consejo de Gobierno

Contenidos

Se mantienen los contenidos inicialmente recogidos en la guía docente.

Volumen de trabajo y planificación temporal de la docencia

Respecto al volumen de trabajo:

Se mantienen las distintas actividades descritas en la Guía Docente pero se modifican las horas de dedicación a cada actividad, como se muestra en la tabla siguiente:

ACTIVIDAD	Horas	% Presencial
Clases de teoría	40.00	70-100
Tutorías regladas	5.00	70-100
Seminarios	5.00	70-100
Estudio y trabajo autónomo	75.00	0
TOTAL	125.00	



Respecto a la planificación temporal de la docencia

El material para el seguimiento de las clases de teoría/tutorías/seminarios de aula permite continuar con la planificación temporal docente tanto en días como en horario, tanto si la docencia es presencial en el aula como si no lo es.

Metodología docente

Asignaturas de teoría: En las clases de teoría y de tutorías de aula se tenderá a la máxima presencialidad posible, siempre respetando las restricciones sanitarias que limitan el aforo de las aulas al 50% de su ocupación habitual. En función de la capacidad del aula y del número de estudiantes matriculados puede ser necesario que parte de los estudiantes deban seguir las clases de manera síncrona en un aula auxiliar. De plantearse esta situación, los estudiantes asistirán al aula del grupo o aula auxiliar para turnos rotativos semanales (preferentemente por orden alfabético). Sin embargo, el sistema de rotación se fijará una vez conocidos los datos reales de matrícula, garantizándose, en cualquier caso, que el porcentaje de presencialidad de todos los estudiantes matriculados en la asignatura es el mismo.

La metodología utilizada para las clases no presenciales será:

1. De forma síncrona mediante las herramientas del aula virtual (Teams, Blackboard ...)
2. De forma asíncrona mediante powers locutados u otras herramientas del aula virtual
3. Resolución de ejercicios y cuestionarios

Si se produce un cierre de las instalaciones por razones sanitarias que afecte total o parcialmente a las clases de la asignatura, éstas serán sustituidas por sesiones no presenciales siguiendo los horarios establecidos y utilizando las herramientas del aula virtual.

Evaluación

Se mantiene el sistema de evaluación descrito en la Guía Docente de la asignatura en la que se han especificado las distintas actividades evaluables así como su contribución a la calificación final de la asignatura.

Si se produce un cierre de las instalaciones por razones sanitarias que afecte al desarrollo de alguna actividad evaluable presencial de la asignatura ésta será sustituida por una prueba de naturaleza similar que se realizará en modalidad virtual utilizando las herramientas informáticas licenciadas por la Universitat de València. La contribución de cada actividad evaluable a la calificación final de la asignatura permanecerá invariable, según lo establecido en esta guía.



Bibliografía

Se mantiene la bibliografía recomendada en la Guía Docente pues es accesible y se complementa con apuntes, diapositivas y problemas subidos a Aula Virtual como material de la asignatura.

BORRADOR