

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

Codi	44604
Nom	Química física avançada
Cicle	Màster
Crèdits ECTS	5.0
Curs acadèmic	2022 - 2023

Titulació/titulacions

Titulació	Centre	Curs	Període
2218 - M.U. en Química	Facultat de Química	1	Primer quadrimestre

Matèries

Titulació	Matèria	Caràcter
2218 - M.U. en Química	1 - Química avançada	Obligatòria

Coordinació

Nom	Departament
PEREZ PLA, FRANCISCO	315 - Química Física

RESUM

L'assignatura de "Química física avançada" forma part de la matèria de "Química avançada". Té per objectiu ampliar i complementar els coneixements de "Química física" adquirits en el grau. En concret, l'assignatura aprofundeix en els coneixements d'"Espectroscòpia molecular" i introdueix les nocions bàsiques de fotoquímica (no estudiades en el grau). L'assignatura també aprofundeix l'estudi termodinàmic dels sistemes reals i permet una comprensió profunda d'aquests sistemes, mitjançant l'ampliació dels coneixements de termodinàmica estadística de sistemes que presenten interaccions intermoleculares. En aquesta línia, s'amplien els coneixements de cinètica química vistos durant el grau, estenent-los a reaccions complexes, i s'introdueixen els conceptes fonamentals de catàlisi homogènia, heterogènia i biocatàlisi. Finalment, s'amplien els coneixements bàsics d'electroquímica, descrivint els processos que tenen lloc sobre els elèctrodes, en concret la cinètica dels processos que ocorren sobre aquests, i s'apliquen els coneixements adquirits a l'estudi del problema de la corrosió electroquímica.



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

Es requereixen els coneixements previs de química que s'imparteixen en les titulacions que s'indiquen en el perfil d'ingrés recomanat per a l'estudiant de Màster.

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

2218 - M.U. en Química

- Que els estudiants sàpiguen aplicar els coneixements adquirits i la seua capacitat de resolució de problemes en entorns nous o poc coneguts dins de contextos més amplis (o multidisciplinaris) relacionats amb la seua àrea d'estudi.
- Que els estudiants siguen capaços d'integrar coneixements i afrontar la complexitat de formular judicis a partir d'una informació que, sent incompleta o limitada, incloga reflexions sobre les responsabilitats socials i ètiques vinculades a l'aplicació dels seus coneixements i judicis.
- Que els estudiants sàpiguen comunicar les conclusions (i els coneixements i les raons últimes que les sustenten) a públics especialitzats i no especialitzats d'una manera clara i sense ambigüitats.
- Ser capaç de resoldre problemes complexos de química, siga en l'àmbit acadèmic, de la investigació o de l'aplicació industrial a nivell d'especialització o màster
- Fomentar, en contextos acadèmicos 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 capaços de dissenyar, realitzar, analitzar i interpretar experiències i dades complexes en l'entorn de la química a nivell d'especialització.
- Adquirir coneixements avançats que permeten valorar la importància de la química en la salut, el medi ambient, nous materials i energia.

RESULTATS D'APRENTATGE (RD 1393/2007) // SENSE CONTINGUT (RD 822/2021)

(1) Conèixer els fonaments físics de les diversos tipus d'espectroscòpies moleculars i de les tècniques que deriven d'aquestes i dels processos fotofísics i fotoquímics.

(2) Saber relacionar les interaccions intermoleculars i la descripció dels diferents models de sistemes reals (gasos, líquids, dissolucions electrolítiques i no electrolítiques) i utilitzar els conceptes de fugacitat i



activitat, de funcions de distribució radial, propietats molars parcials i funcions d'excés.

(3) Conèixer els conceptes de la termodinàmica estadística per a sistemes de partícules independents i tenint en compte les interaccions intermoleculars i la seua aplicació a l'obtenció de les funcions d'estat dels gasos reals, els líquids i al comportament dels sòlids.

(4) Saber obtenir les dades cinètiques rellevants de reaccions químiques a partir de mecanismes proposats i conèixer els conceptes bàsics de la catàlisi homogènia, heterogènia i la biocatàlisi.

(5) Conèixer els fonaments de la cinètica electròica i la seua aplicació a l'estudi i la inhibició de la corrosió.

DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

1. Espectroscopia molecular y fotoquímica

Aspectes generals de la interacció entre la llum i la matèria. Models de radiació electromagnètica. Radiació i matèria: absorció, emissió, dispersió, difusió i tècniques espectroscòpiques relacionades. Regles de selecció. El senyal espectroscòpic: posició, amplària, intensitat. Emissió làser. Coeficients d'absorció.

Espectroscòpia de ressonància magnètica nuclear. Aspectes bàsics de la tècnica de RMN en química. Factors que determinen la posició de les bandes en RMN. Tècniques de polsos (RMN-TF). Decaïment lliure de la inducció (FID). Relaxació de spin: temps de relaxació longitudinal i transversal.

Espectroscòpies electròniques d'absorció i emissió. Aspectes bàsics de l'estructura dels espectres electrònics en molècules diatòmiques. Estructura vibracional i principi de Franck-Condon. Diferents tipus de transicions en molècules poliatòmiques. Fotofísica i fotoquímica: transicions radiatives i no radiatives. Espectroscòpies de emissió: fluorescència i fosforescència.

2. Termodinàmica estadística de sistemes amb interaccions

Interaccions intermoleculars. Desenvolupaments multipolars; forces atractives; forces repulsives; models d'interaccions intermoleculars i les seues limitacions.

Termodinàmica estadística de sistemes reals i fases condensades. Funció de partició de sistemes reals i propietats termodinàmiques. Aplicació de la termodinàmica estadística als gasos reals. Capacitat calorífica dels sòlids cristal·lins. Funció de distribució radial i estructura dels líquids.

Mètodes de simulació. Camps de força. Estratègies de simulació de sistemes realistes. Dinàmica molecular. Mètode Monte Carlo.

3. Cinètica Química de reaccions complexes

Mecanisme i llei de velocitat. Repàs de conceptes bàsics. Reaccions complexes. Mecanisme i llei de velocitat. Simplificació de la llei de velocitat. Equacions lineals estacionàries.

Detecció d'intermedis de reacció. Productes intermedis i centres de reacció. Tècniques de detecció i caracterització de productes intermedis. La tècnica de flux-detingut. Altres tècniques (SF-EXAFS, MS-ESI).



Anàlisi de dades en Cinètica Química I. Seguiment de propietats físiques. Anàlisi de reaccions que segueixen formalment un ordre. Anàlisi general de reaccions simples.

Anàlisi de dades en Cinètica Química II. Model de resposta. Respostes bidimensionals. Factorització de respostes multicanal. Model químic. Sistemes dequacions diferencials i algebraicodiferencials. Integració del model. Sistemes rígids (stiff). Tècnica de mínims quadrats. Funcions objectiu. Minimització de la funció objectiu.

4. Processos electròdics i Corrosió

Electroquímica Molecular i de Materials.

Visió general de l'Electroquímica. Tipus d'elèctrodes. Pertorbació i resposta elèctrica en cel·les. Processos electròdics. La regió interfacial elèctrode / dissolució. Escales de potencial i unitats de magnituds electroquímiques.

Irreversibilitat en Cel·les Electroquímiques.

Processos electròdics faradaics i no faradaics. Transport en cel·les electroquímiques. Processos nerstians controlats per difusió. El coeficient de transferència electrònica i el paràmetre de simetria.

Simulació i Tractament de Dades en Processos electròdics.

Corbes intensitat-potencial. Voltamperometria de films electroactius. Electrosíntesi i caracterització de polímers conductors. Electrodepòsits metàl·lics i electrodisolucions. Circuits elèctrics equivalents. Simulació i ajust multiparamètrica de la resposta electròdica.

Corrosió Metàl·lica i la seva Inhibició.

El fenomen de la Corrosió. Tipus de corrosió. Tècniques experimentals per a la mesura de la velocitat de corrosió. Predicció de la corrosió de materials tecnològics. Mètodes per a la inhibició de la corrosió.

5. Catàlisi

Conceptes bàsics. Interacció catalitzador/substrat. Principi de Sabatier. Desactivació del catalitzador: sinteritzat i degradació tèrmica.

Catàlisi homogènia. Catàlisi per complexos metàl·lics. Catàlisi àcid-base. Organocatàlisi. Recuperació i reciclatge del catalitzador homogeni. Catàlisi híbrida. Click Chemistry. Biocatàlisi.

Catàlisi heterogènia. Etapes del procés catalític. Cinètiques Langmuir-Hinshelwood. Catàlisi sòlid-gas. Tipus de catalitzadors sòlids. Caracterització dels catalitzadors. Sistemes catalítics líquid/sòlid i líquid/líquid. Catalitzadors de transferència de fase.

**VOLUM DE TREBALL**

ACTIVITAT	Hores	% Presencial
Classes de teoria	40,00	100
Tutories reglades	5,00	100
Seminaris	5,00	100
Elaboració de treballs individuals	15,00	0
Estudi i treball autònom	30,00	0
Lectures de material complementari	10,00	0
Preparació d'activitats d'avaluació	20,00	0
TOTAL	125,00	

METODOLOGIA DOCENT

L'assignatura s'imparteix a través de lliçons magistrals participatives, seminaris on es realitzaran, entre altres activitats formatives, problemes pràctics aplicats, i classes tutoritzades orientades a avaluar la comprensió de l'assignatura per part de l'alumne.

AVALUACIÓ**Primera convocatòria**

La qualificació de l'assignatura en primera convocatòria s'obté de les qualificacions de l'examen final, de les activitats d'avaluació contínua realitzades i dels treballs presentats al llarg del curs. Examen, treballs i activitats es mitjanaran d'acord amb els percentatges següents:

- a) Examen final: 60%.
- b) Activitats d'avaluació contínua (b.1 + b.2): 40 %
 - b.1) Activitats realitzades al llarg del curs: 20 %
 - b.2) Treballs presentats al llarg del curs: 20 %

Segona convocatòria

La qualificació de l'assignatura en segona convocatòria s'obté de les qualificacions de l'examen de segona convocatòria i dels treballs presentats al llarg del curs. Examen i treballs es mitjanaran d'acord amb els percentatges següents:

- a) Examen final: 80 %
- b) Treballs realitzats al llarg del curs: 20 %

**REFERÈNCIES****Bàsiques**

- 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.

Complementàries

- 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.

