

Química Física

Código: 102504
Créditos ECTS: 6

Titulación	Tipo	Curso	Semestre
2502444 Química	OB	3	1

Contacto

Nombre: Josep Maria Lluch López

Correo electrónico: JoseMaria.Lluch@uab.cat

Uso de idiomas

Lengua vehicular mayoritaria: catalán (cat)

Algún grupo íntegramente en inglés: No

Algún grupo íntegramente en catalán: No

Algún grupo íntegramente en español: No

Equipo docente

Iluminada Gallardo García

José Peral Pérez

Prerequisitos

Es recomendable haber cursado "Fundamentos de Química", "Química Cuántica", y "Termodinámica Química".

Objetivos y contextualización

El objetivo de esta asignatura es que el alumno consolide su formación en Química Física. Por eso se presentarán, por un lado, los principales conceptos de Cinética Química, una de las áreas fundamentales de la Química Física que el estudiante todavía tiene que conocer. Por otro lado, se abordará el estudio otras áreas de la Química Física de naturaleza particular y, por lo tanto, de más difícil clasificación. Así, se estudiarán los Fenómenos de Transporte, tanto en fase gas, como en fase líquida, la Química de Superficies y las Cinéticas Heterogéneas, la Electroquímica, tanto de equilibrio como dinámica, y las Macromoléculas y los Coloides. Todo esto se hará de forma que el estudiante pueda captar las diferentes estrategias con las que la Química Física ataca el problema del estudio de los sistemas químicos: a partir de visiones microscópicas o macroscópicas, o en situaciones de equilibrio o de cambio. En aquellas ocasiones en las que la sencillez de los sistemas en estudio lo permita, se intentarán relacionar estas diferentes estrategias.

Competencias

- Adaptarse a nuevas situaciones.
- Aplicar los conocimientos químicos a la resolución de problemas de naturaleza cuantitativa o cualitativa en ámbitos familiares y profesionales.
- Aprender de forma autónoma.
- Comunicarse de forma oral y escrita en la lengua nativa.
- Demostrar iniciativa y espíritu emprendedor.
- Demostrar motivación por la calidad.

- Demostrar que comprende los conceptos, principios, teorías y hechos fundamentales de las diferentes áreas de la Química.
- Gestionar la organización y planificación de tareas.
- Gestionar, analizar y sintetizar información.
- Interpretar los datos obtenidos mediante medidas experimentales, incluyendo el uso de herramientas informáticas, identificar su significado y relacionarlos con las teorías químicas, físicas o biológicas apropiadas.
- Mantener un compromiso ético.
- Mostrar sensibilidad hacia temas medioambientales.
- Obtener información, incluyendo la utilización de medios telemáticos.
- Operar con un cierto grado de autonomía e integrarse en poco tiempo en el ambiente de trabajo.
- Poseer destreza para el cálculo numérico.
- Proponer ideas y soluciones creativas.
- Razonar de forma crítica.
- Reconocer y analizar problemas químicos y plantear respuestas o trabajos adecuados para su resolución, incluyendo en casos necesarios el uso de fuentes bibliográficas.
- Resolver problemas y tomar decisiones.
- Utilizar correctamente la lengua inglesa en el ámbito de la Química.
- Utilizar la informática para el tratamiento y presentación de información.

Resultados de aprendizaje

1. Adaptarse a nuevas situaciones.
2. Analizar de procesos de adsorción en superficies y ajuste con las diferentes isotermas.
3. Analizar y resolver problemas del ámbito de la Cinética Química homogénea.
4. Aprender de forma autónoma.
5. Clasificar y analizar las propiedades de los coloides y las macromoléculas.
6. Comunicarse de forma oral y escrita en la lengua nativa.
7. Definir la química de superficies.
8. Definir los coloides y macromoléculas.
9. Demostrar iniciativa y espíritu emprendedor.
10. Demostrar motivación por la calidad.
11. Describir los componentes de la electroquímica.
12. Explicar la cinética química.
13. Gestionar la organización y planificación de tareas.
14. Gestionar, analizar y sintetizar información.
15. Identificar las denominaciones inglesas de las variables fisicoquímicas fundamentales.
16. Identificar los fenómenos de transporte.
17. Interpretar la evolución de la concentración de las especies con el tiempo y su relación con el mecanismo de la reacción.
18. Interpretar los datos referentes a la tensión superficial (tensoactivos), mojabilidad (ángulos de contacto) y detergencia.
19. Interpretar los gráficos Intensidad/Potencial (I/E) y su relación con el funcionamiento de las pilas.
20. Mantener un compromiso ético.
21. Mostrar sensibilidad hacia temas medioambientales.
22. Obtener información, incluyendo la utilización de medios telemáticos.
23. Operar con un cierto grado de autonomía e integrarse en poco tiempo en el ambiente de trabajo.
24. Poseer destreza para el cálculo numérico.
25. Proponer ideas y soluciones creativas.
26. Razonar de forma crítica.
27. Reconocer y analizar problemas relacionados con la química de superficies (adherencia y detergencia).
28. Reconocer, analizar y resolver problemas electroquímicos (pilas).
29. Resolver problemas de forma cualitativa en fenómenos de Transporte, coloides y macromoléculas.
30. Resolver problemas de forma cuantitativa en química de superficies, cinética química y electroquímica.
31. Resolver problemas y tomar decisiones.
32. Resumir un texto científico relacionado con la asignatura en lengua inglesa.
33. Utilizar la informática para el tratamiento y presentación de información.
34. Utilizar las denominaciones inglesas de los diferentes estados de la materia y de sus cambios.

Contenido

Unidad 1. CINÉTICA HOMOGÉNEA

Velocidad de reacción.

Ecuación de velocidad. Orden de reacción.

Reacciones elementales y reacciones complejas.

Métodos experimentales.

Determinación del orden de la reacción.

Integración de la ecuación de velocidad. Reacciones de orden 0, 1, 2 y n.

Periodo de semirreacción.

Método diferencial de Van't Hoff.

Dependencia de la constante de velocidad con la temperatura. Ecuación de Arrhenius.

Energía de activación, una magnitud experimental.

Reacciones complejas. Mecanismos de reacción.

Reacciones reversibles.

Reacciones consecutivas. Reacciones paralelas.

Aproximaciones del estado estacionario y del equilibrio.

Reacciones en cadena lineal y ramificada. Límites de explosión.

Fundamentos básicos de Termodinámica Estadística. Función de partición.

Teoría del estado de transición.

Formulación termodinámica de la teoría del estado de transición.

Interpretación de las diferentes magnitudes. Relación entre ellas.

Efecto túnel.

Reacciones en disolución.

Reacciones controladas por difusión y por activación.

Catálisis. Tipos de catálisis.

Catálisis homogénea.

Catálisis enzimática. Ecuación de Michaelis-Menten.

Mecanismo de Michaelis-Menten.

Mecanismo de Briggs-Haldane.

Unidad 2. FENÓMENOS DE TRANSPORTE

Definición. Tipos.

Teoría cinética de gases.

Distribución de velocidades.

Colisiones moleculares y recorrido libre medio.

Velocidad de efusión. Ley de Graham.

Transporte en un gas ideal. Primera ley de Fick de la difusión.

Conductividad térmica.

Fenómenos de transporte en líquidos.

Conductancia y conductividad.

Electrólitos fuertes y débiles.

Ley de Kohlrausch.

Ley de dilución de Ostwald.

Movilidad de los iones.

Números de transporte.

Difusión.

Ecuación de Nernst-Einstein.

Ecuación de Stokes-Einstein.

Segunda ley de Fick de la difusión.

Difusión con convección.

Ecuación de Einstein-Schmoluchowski.

Unidad 3.^a LA INTERFASE (QUIMICA DE SUPERFICIES)

Interfases.

Tensión superficial.

Interfases curvadas.

Ley de Laplace.

Ascenso capilar

Termodinámica de superficies: isoterma de adsorción de Gibbs. Adsorción y tensioactivos.

Unidad 3b. CINÉTICA HETEROGÉNEA

Fisorción y quimisorción.

Fracción de recubrimiento.

Isotermas de adsorción: Langmuir, Freundlich, BET y Temkin.

Catálisis heterogénea.

Mecanismo de Langmuir-Hinshelwood.

Mecanismo de Eley-Rideal.

Unidad 4. ELECTROQUÍMICA

Equilibrio Electroquímico.

Introducción.

Ecuación de Nernst

Parámetros termodinámicos.

Celdas Galvánicas

Celdas de Transporte.

Aplicaciones.

Cinética Electroquímica.

Introducción

Cinética de transferencia de carga en los electrodos.

Efecto del Transporte de Materia

Métodos Electroquímicos.

Unidad 5. COLOIDES Y MACROMOLÉCULAS

Coloides

Clasificación, preparación y aplicaciones.

Estructura, superficie y estabilidad de los coloides. Potencial zeta. Floculación.

Coloides de asociación. Micelas, bicapas y vesículas/liposomas. Membranas.

Macromoléculas

Macromoléculas naturales y sintéticas.

Distribuciones de pesos moleculares. Espectrometría de masas. Dispersión de luz. Sedimentación. Electroforesis. Viscosidad.

Estructuras de las macromoléculas

Metodología

Actividades Dirigidas:

Clases Teóricas y Clases de Problemas

Actividades Autónomas:

Estudio, Resolución de Problemas, Lecturas y Obtención de Información

Actividades

Título	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
Tipo: Dirigidas			
Clases Teóricas	38	1,52	2, 5, 6, 8, 7, 11, 12, 14, 16, 17, 19, 20, 21, 22, 25, 26, 27
Clases de problemas	12	0,48	
Tipo: Autónomas			
Estudio, Resolución de problemas, Lecturas y Obtención de información	90	3,6	13, 14, 22, 23, 26, 31

Evaluación

Evaluación de la Asignatura

Esta asignatura utilizará la evaluación continuada para verificar que el alumno ha logrado las competencias determinadas en el plan de estudios.

A efectos de evaluación, la asignatura se divide en dos partes: exámenes y trabajos de seguimiento

Exámenes: (80%)

A lo largo del curso se realizarán dos exámenes parciales (P1, P2) . Cada uno de los exámenes se puntuará con una nota entre 0 y 10.

Trabajos de Seguimiento: (20%)

A lo largo del curso se realizarán dos series de pruebas (S1, S2) (recoger problemas hechos a casa, trabajos, test o problemas en el aula, etc) que serán considerados evidencias del trabajo personal del alumno. Cada una de las series de pruebas correspondientes a las evidencias de los trabajos de seguimiento dará lugar a una nota entre 0 y 10, y no son recuperables.

Calificaciones:

Alumnos que superen la asignatura por curso:

Para superar la asignatura por curso se tienen que cumplir las tres condiciones siguientes:

1) La nota final de CURSO (NFC) tiene que ser 5,0 como mínimo.

$$NFC = 0,80 [0,50(P1 + P2)] + 0,20 [0,50(S1 + S2)]$$

2) Las dos notas de examen P1 y P2 tienen que ser 4,0 como mínimo.

3) Es obligatorio tener calificación en las dos series de trabajos de seguimiento.

Alumnos que no superen la asignatura por curso

y alumnos que quieran mejorar su nota de curso:

Los alumnos que no superen la asignatura por curso, de acuerdo con el párrafo anterior, o que quieran mejorar su calificación, podrán presentarse a un examen de recuperación que incluirá toda la materia.

La nota del examen de recuperación sustituirá la nota que se pudiera tener del conjunto de los dos parciales y, por lo tanto, tendrá un peso del 80% (la nota de los trabajos de seguimiento no se podrá recuperar).

Para participar a la recuperación el alumnado tiene que haber sido previamente evaluado en un conjunto de actividades el peso de las cuales equivalga a un mínimo de dos terceras partes de la calificación total de la asignatura

La calificación de No evaluable se aplicará si el número de actividades de evaluación es inferior al 50% de las programadas para la asignatura.

Actividades de evaluación

Título	Peso	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
Evidencias	20%	2	0,08	3, 2, 4, 5, 6, 8, 7, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 16, 15, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 24, 33, 34
Examen de recuperación	80%	2	0,08	1, 3, 2, 5, 8, 7, 10, 11, 12, 14, 16, 17, 18, 19, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 24
Examen parcial 1	40%	3	0,12	1, 3, 6, 10, 12, 14, 16, 17, 25, 26, 29, 30, 31, 24
Examen parcial 2	40%	3	0,12	1, 2, 5, 6, 8, 7, 10, 11, 14, 18, 19, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 24

Bibliografía

Bibliografía básica

Physical Chemistry, P.W. Atkins, 8th edition, Oxford University Press, 2006

Bibliografía complementaria

Fisicoquímica, (Vol. 1 i 2), Ira N. Levine, 5ª edición, McGraw Hill, 2004