

Grado en Química

Curso Tercero

1. Identificación de la asignatura

NOMBRE	Química Física III	CÓDIGO	GQUIMI01-3-003
TITULACIÓN	Graduado o Graduada en Química	CENTRO	Facultad de Química
TIPO	Obligatoria	Nº TOTAL DE CREDITOS	6.0
PERIODO	Segundo Semestre	IDIOMA	Español
COORDINADOR/ES	EMAIL		
VAN-DER-MAELEN URIA JUAN FRANCISCO	fvu@uniovi.es		
PROFESORADO	EMAIL		
LUAÑA CABAL VICTOR	vluana@uniovi.es	(English Group)	
VAN-DER-MAELEN URIA JUAN FRANCISCO	fvu@uniovi.es		

2. Contextualización

La presente asignatura pertenece al módulo "Fundamental" y a la materia "Química Física" del plan de estudios del Grado en Química de la Universidad de Oviedo (BOE de 15 de Julio de 2010, pp. 62634-62638), tiene carácter obligatorio y se localiza dentro del segundo semestre del tercer curso de la citada titulación.

Esta asignatura está íntimamente relacionada con las restantes asignaturas teóricas del módulo "Fundamental" del Grado en Química, en especial con las que pertenecen a la misma materia "Química Física", pero también con las que pertenecen a las materias "Química Analítica", "Química Orgánica", "Química Inorgánica", "Ciencia de Materiales", y "Bioquímica". Sin embargo, las dos asignaturas que tienen mayor relación con la presente asignatura son "*Química Física I*", del segundo curso del grado, y "*Química Física II*", del primer semestre del tercer curso. Los fenómenos de no-equilibrio estudiados en la presente asignatura, desde un punto de vista tanto macroscópico como microscópico, tienen un claro precedente en los fenómenos de equilibrio estudiados en las dos asignaturas recién mencionadas, desde un punto de vista macroscópico en "Química Física I" y desde un punto de vista microscópico en "Química Física II".

Además, esta asignatura desarrolla todo el formalismo teórico esencial para el correcto seguimiento de otras asignaturas que se cursan con posterioridad, como es el caso de la asignatura "*Experimentación en Química Física II*", la cual se imparte en el cuarto curso del grado, donde se llevan a cabo varios experimentos de 'Cinética Química' y de 'Fenómenos de Transporte y Superficie', por no mencionar que es precisamente en la presente asignatura en donde se construyen los puentes entre los puntos de vista microscópico y macroscópico de los estados de agregación de la materia (gases puros, líquidos puros, mezclas, disoluciones, suspensiones, sólidos, ...), a través del estudio de la 'Termodinámica Estadística' y de la 'Cinética Física', entre otros tópicos que se tratan a lo largo del curso.

3. Requisitos

Para cursar esta asignatura es requisito obligatorio que los alumnos hayan superado las siguientes asignaturas del primer curso del Grado en Química: “Operaciones Básicas de Laboratorio y Herramientas Informáticas”, “Química General”, “Física General I”, “Física General II”, y “Matemáticas”, así como la asignatura “Química Física I” del segundo curso.

Por otra parte, aunque no es obligatorio, **es altamente recomendable** que los alumnos hayan también superado la asignatura “Química Física II” (QFII), la cual se cursa en el primer semestre del tercer curso (o, al menos, que hayan seguido las clases con aprovechamiento y se hayan presentado al examen de la misma), dado que los modelos y teorías acerca del comportamiento microscópico de la materia en equilibrio (en especial de átomos y moléculas aislados), los cuales se estudian en QFII, se utilizan profusamente en la presente asignatura. Por ejemplo, la descripción teórica que se realiza en QFII utilizando el formalismo de la ‘Mecánica Cuántica’ de los niveles de energía moleculares, tanto los rotacionales, como los vibracionales y los electrónicos, es esencial para un correcto entendimiento de las funciones de partición moleculares que se utilizan en el estudio de la ‘Termodinámica Estadística’ y de la ‘Dinámica Molecular’, incluso a un nivel semi-clásico.

4. Competencias y resultados de aprendizaje

a) *Competencias generales.*

- CG-1: Desarrollar capacidad para el análisis y la síntesis del conocimiento científico.
- CG-2: Resolver problemas científicos de forma eficaz.
- CG-3: Poseer conocimientos de informática dentro del ámbito de la Química.
- CG-4: Mostrar competencia en la organización y planificación del tiempo y del trabajo.
- CG-5: Desarrollar la habilidad de tomar decisiones complejas.
- CG-6: Gestionar adecuadamente información científica.
- CG-8: Comunicar correctamente información científica, tanto oralmente como por escrito.
- CG-9: Aprender de forma autónoma.
- CG-12: Adquirir sensibilidad respecto de los temas relacionados con el medio ambiente.
- CG-17: Desarrollar razonamiento crítico.

CG-18: Aprender a trabajar en equipo.

CG-20: Adquirir competencias básicas en el uso de tecnologías de la información y comunicación.

b) Competencias específicas.

CE-2: Correlacionar las propiedades macroscópicas de la materia con su composición microscópica (átomos, iones, y moléculas).

CE-8: Comprender la cinética de la transformación química, incluyendo los fenómenos catalíticos y los mecanismos de reacción.

CE-20: Resolver problemas cuantitativos y cualitativos de acuerdo con modelos y teorías previamente desarrollados.

CE-22: Adquirir habilidad para evaluar, interpretar y resumir información química correctamente.

CE-24: Procesar y computar datos relativos a la información y el conocimiento químicos.

CE-30: Interpretar correctamente datos experimentales sobre la base de teorías y modelos subyacentes.

CE-32: Utilizar adecuadamente los métodos inductivo y deductivo en el campo de la química.

CE-35: Realizar cálculos con utilización correcta de magnitudes y unidades.

c) Resultados del aprendizaje.

- Adquirir conocimiento y comprensión de los conceptos, leyes empíricas, hechos experimentales, modelos teóricos, y teorías físicas relativas a las disciplinas 'Cinética Física', 'Termodinámica Estadística', 'Cinética Química', y 'Fenómenos de Superficie y de Transporte' desde el punto de vista de la Química Física.

- Ser capaz de resolver problemas y ejercicios tanto algebraicos como numéricos de 'Cinética Física', 'Termodinámica Estadística', 'Cinética Química', y 'Fenómenos de Superficie y de Transporte', así como de interpretar correctamente los resultados obtenidos.

- Utilizar y entender fuentes bibliográficas relevantes.

- Comunicar correctamente información científica, tanto oralmente como por escrito.

5. Contenidos

Capítulo 1: Teoría Cinética y Termodinámica Estadística.

Probabilidad y distribuciones de probabilidad. Distribuciones de velocidad. Teoría cinética elemental de los fenómenos de transporte: difusión, conductividad térmica, conductividad eléctrica, viscosidad. Distribuciones en el espacio fásico. Conceptos básicos de Mecánica Estadística: definición de estado estacionario y de equilibrio. Funciones de partición: su relación con las distribuciones de probabilidad. El colectivo microcanónico en un gas y en un cristal. El colectivo canónico en un gas y en un cristal. Otros colectivos estadísticos: cálculo de magnitudes termodinámicas. Termodinámica Estadística de un gas mono y poliatómico. Mezclas de gases y equilibrio químico: cálculo de constantes de equilibrio. (23 horas presenciales = 20 CEX + 3 PA)

Capítulo 2: Cinética Química.

Conceptos básicos: Velocidad de reacción, constante de velocidad, ecuación cinética. Orden parcial y orden global de reacción. Integración de ecuaciones cinéticas. Mecanismos de reacción. Variación con la temperatura de la velocidad de reacción. Reacciones químicas en disolución. Catálisis homogénea: catálisis ácida y básica, autocatálisis, catálisis enzimática. Modelos teóricos en Cinética Química: modelo de colisiones y modelo del complejo activado. Superficies de potencial (SEP): localización de reactivos, productos y estados de transición en una SEP. (12 horas presenciales = 10 CEX + 2 PA)

Capítulo 3: Fenómenos de superficie.

Estudio termodinámico de la interfase no cargada: la isoterma de adsorción de Gibbs. Isotermas empíricas de adsorción gas/sólido, líquido/sólido, y soluto/sólido. Catálisis heterogénea. Fenómenos de superficie con interfase cargada: doble capa eléctrica. Modelos teóricos de la doble capa eléctrica. Fenómenos electrocinéticos. Cinética electroquímica. (8 horas presenciales = 7 CEX + 1 PA)

Capítulo 4: Fenómenos de transporte.

Estudio fenomenológico de los fenómenos de transporte en disoluciones electrolíticas y no electrolíticas: la ecuación general del transporte. Transporte de materia en líquidos y disoluciones líquidas. Transporte de energía en líquidos y disoluciones líquidas. Transporte de momento lineal en líquidos y disoluciones líquidas. Fenómenos no lineales. (6 horas presenciales = 5 CEX + 1 PA)

6. Metodología y plan de trabajo

Clases Expositivas (CEX, 42 horas presenciales): En estas clases el profesor mostrará y discutirá la materia objeto de estudio, con especial énfasis en los aspectos más novedosos y en aquellos de mayor complejidad, integrando los conceptos puramente teóricos con ejemplos ilustrativos que faciliten la comprensión y el análisis. Por estas razones, **es altamente recomendable** una asistencia regular por parte de los alumnos a estas clases. También es necesario que el estudiante complete la información facilitada por el profesor con **la lectura y el estudio de la bibliografía recomendada**, con objeto de transformar esa información adquirida en el aula en verdadero

conocimiento.

Prácticas de Aula (PA, 7 horas presenciales): La aplicación concreta del conocimiento que los estudiantes hayan adquirido a través de las CEX y del estudio de las fuentes bibliográficas tendrá lugar en estas sesiones. Los estudiantes dispondrán con antelación a cada una de las PA de los enunciados de ejercicios teóricos y problemas numéricos a discutir en las mismas, por lo que **sería deseable** que acudieran a las sesiones con, al menos, una somera idea de cómo abordar su solución, de forma que se puedan **plantear dudas concretas sobre los mismos**. El profesor resolverá con detalle un conjunto seleccionado de los ejercicios propuestos y dará indicaciones para la resolución de los restantes.

Tutorías Grupales (TG, 4 horas presenciales): En estas sesiones **los alumnos deberán tener un papel activo**, que consistirá en la exposición por su parte, en clase y de manera voluntaria, de las soluciones a aquellos ejercicios y problemas que no hayan sido resueltos por el profesor en las PA. Estas soluciones también podrán entregarse por escrito, asimismo de manera voluntaria. Los alumnos dispondrán, a través del Campus Virtual, de las soluciones detalladas de todos los ejercicios propuestos una vez finalizadas las sesiones correspondientes.

MODALIDADES		Horas	%	Totales
Presencial	Clases Expositivas (CEX)	42	70,00	60
	Prácticas de Aula (PA)	7	11,66	
	Tutorías Grupales (TG)	4	6,67	
	Otras Actividades	4	6,67	
	Sesiones de evaluación	3	5,00	
No presencial	Trabajo en grupo	10	11,11	90
	Trabajo individual	80	88,89	
Total		150		

7. Evaluación del aprendizaje de los estudiantes

Aspecto	Criterios	Instrumento	Peso
Conceptos de la materia (Capítulos 1-4)	Resolución de ejercicios y problemas numéricos y algebraicos, así como contestación a cuestiones teóricas, todo ello relacionado con la materia.	Examen escrito individual	80%
Trabajo diario	<ul style="list-style-type: none"> - Participación activa en las PA. - Participación activa en las TG. - Presentación por escrito de soluciones de ejercicios y problemas. - Expresión oral y escrita. 	Evaluación continua	20%

Convocatoria ordinaria:

Para aprobar la asignatura en la convocatoria ordinaria es obligatorio cumplir dos requisitos: (1) obtener un mínimo de 4,5 puntos sobre 10 (4,5/10) en el examen escrito individual, y (2) obtener un mínimo de 5,0 puntos sobre 10 (5/10) en la calificación global.

Convocatoria extraordinaria:

En cualquiera de las convocatorias extraordinarias el estudiante debe aprobar (5/10) un examen escrito, con un peso de un 100% en la nota.

8. Recursos, bibliografía y documentación complementaria

a) **Textos base:**

1. P. W. Atkins y J. de Paula, *Physical Chemistry*, (2 vols.), Freeman, 2014.

Existen ediciones en español de esta referencia.

2. I. N. Levine, *Physical Chemistry*, McGraw-Hill, 2008.

Existen ediciones en español de esta referencia.

b) Textos de consulta:

1. I. Tuñón y E. Silla, *Química Molecular Estadística: Termodinámica Estadística para químicos y bioquímicos*, Síntesis, 2008.
2. D. A. McQuarrie, *Statistical Mechanics*, University Science Books, 2000.
3. B. Widom, *Statistical Mechanics: A concise introduction for chemists*, Cambridge University Press, 2002.
4. J. I. Steinfeld, J. S. Francisco, y W. L. Hase, *Chemical Kinetics and Dynamics*, Prentice Hall, 1999.
5. G. A. Somorjai y Y. Li, *Introduction to Surface Chemistry and Catalysis*, John Wiley & Sons, 2010.
6. C. H. Hamann, A. Hamnett, y W. Vielstich, *Electrochemistry*, Wiley-VCH, 2007.

Documentación complementaria (archivos 'pdf' con copias de las diapositivas del material tratado en clase, enunciados de los ejercicios y problemas, etc.) estará disponible a través del Campus Virtual en la dirección: www.uniovi.es/recursos/campusvirtual.

