



Guía Docente:

QUÍMICA FÍSICA II



FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS
UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID
CURSO 2013-2014



I.- IDENTIFICACIÓN

| | |
|---------------------------------|----------------------|
| NOMBRE DE LA ASIGNATURA: | Química Física II |
| NÚMERO DE CRÉDITOS: | 12 |
| CARÁCTER: | Obligatoria |
| MATERIA: | Química Física |
| MÓDULO: | Fundamental |
| TITULACIÓN: | Grado en Química |
| SEMESTRE/CUATRIMESTRE: | Anual (tercer curso) |
| DEPARTAMENTO/S: | Química Física I |

PROFESOR/ES RESPONSABLE/S:

| | |
|--------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Coordinadora de la asignatura | Profesora: CONCHA PANDO GARCÍA-PUMARINO Departamento: Química Física I Despacho: QA-261 e-mail: pando@quim.ucm.es |
| Coordinadora del laboratorio | Profesora: MERCEDES TARAVILLO CORRALO Departamento: Química Física I Despacho: QA-258 e-mail: mtaravil@quim.ucm.es |

| Grupo A | |
|------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 1^{er} cuatrimestre | Profesora: AURORA COMPOSTIZO SAÑUDO Departamento: Química Física I Despacho: QB-205 e-mail: acompost@quim.uc.es |
| Teoría Seminario Tutoría | |
| 2^o cuatrimestre | Profesora: CONCHA PANDO GARCÍA-PUMARINO Departamento: Química Física I Despacho: QA-261 e-mail: pando@quim.ucm.es |
| Teoría Seminario Tutoría | |
| Grupo B | |
| 1^{er} cuatrimestre | Profesor: ANDRÉS GUERRERO MARTÍNEZ Departamento: Química Física I Despacho: QA-247 e-mail: aguerrero@quim.ucm.es |
| Teoría Seminario Tutoría | |
| 2^o cuatrimestre | Profesor: EDUARDO SANZ GARCÍA Departamento: Química Física I Despacho: QB-256 e-mail: esa01@quim.ucm.es |
| Teoría Seminario Tutoría | |



| Grupo C | |
|----------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 1^{er} cuatrimestre Teoría Seminario Tutoría | Profesor: EDUARDO ENCISO RODRÍGUEZ Departamento: Química Física I Despacho: QA-265 e-mail: enciso@quim.ucm.es |
| 2^o cuatrimestre Teoría Seminario Tutoría | Profesora: MERCEDES TARAVILLO CORRALO Departamento: Química Física I Despacho: QA-258 e-mail: mtaravil@quim.ucm.es |
| Grupo D | |
| 1^{er} cuatrimestre Teoría Seminario Tutoría | Profesor: ALBERTINA CABAÑAS POVEDA Departamento: Química Física I Despacho: QA-276 e-mail: a.cabanas.quim.ucm.es |
| 2^o cuatrimestre Teoría Seminario Tutoría | Profesor: ANTONIO REY GAYO Departamento: Química Física I Despacho: QB-251 e-mail: jsbach@quim.ucm.es |
| Grupo E | |
| 1^{er} cuatrimestre Teoría Seminario Tutoría | Profesor: LUIS GONZÁLEZ MACDOWELL Departamento: Química Física I Despacho: QB-237 e-mail: lmac@quim.ucm.es |
| 2^o cuatrimestre Teoría Seminario Tutoría | Profesor: MAURICIO ALCOLEA PALAFOX Departamento: Química Física I Despacho: QA-247 e-mail: alcolea@quim.ucm.es |

II.- OBJETIVOS

■ OBJETIVO GENERAL

En esta asignatura se pretende transmitir al alumno los conceptos fundamentales de termodinámica, cinética, superficies e interfases y polímeros y coloides que un graduado en química necesita. Se complementarán los conocimientos de termodinámica química que el alumno ha adquirido en el primer curso y se abordará el estudio de la termodinámica estadística y la teoría cinética y propiedades de transporte. A continuación se estudiará la cinética de las reacciones químicas, superficies e interfases, incluyendo la catálisis homogénea y heterogénea y las reacciones electródicas. Finalmente se incluyen los conceptos y técnicas experimentales básicas en el área de polímeros y coloides.



Un objetivo general, de vital importancia, es el de inculcar en el alumno una concepción cuantitativa de la Química; en este sentido es fundamental transmitir al alumno el papel que la Química Física desempeña en la Química, no sólo como conjunto de conceptos, teorías y herramientas experimentales y de cálculo, capaces de explicar los objetos y fenómenos que atañen a la Química, sino como motor de la ciencia y la tecnología química.

■ OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Conocer los potenciales termodinámicos, especialmente el potencial químico, y su utilización en el estudio de sistemas multicomponentes.
- Entender las leyes y propiedades de las disoluciones ideales y reales, incluyendo las formadas por electrolitos.
- Aprender los conceptos y herramientas básicas de la termodinámica estadística y su aplicación en el caso de sistemas no interaccionantes.
- Introducir al alumno en la descripción de las fuerzas intermoleculares mediante los potenciales empíricos y su aplicación en el cálculo de propiedades de sistemas interaccionantes.
- Conocer los conceptos fundamentales de teoría cinética de gases y el transporte en fases condensadas.
- Aprender los aspectos fundamentales de la cinética química tales como la relación entre la ecuación cinética y el mecanismo de reacciones complejas, las teorías de velocidades de reacción, la fotoquímica y la catálisis homogénea y heterogénea.
- Iniciar al alumno en el conocimiento de las propiedades de superficies e interfases como la tensión superficial y la adsorción de gases en sólidos.
- Relacionar las propiedades de superficies e interfases con otros fenómenos como, a nivel elemental, la catálisis heterogénea.
- Conocer las propiedades de equilibrio y de transporte en las disoluciones de electrolitos y el comportamiento de la interfase electrificada, incluyendo la cinética de los procesos electroquímicos.
- Introducir al alumno en los conceptos y técnicas experimentales básicas en el área de polímeros y coloides.

III.- CONOCIMIENTOS PREVIOS Y RECOMENDACIONES

■ CONOCIMIENTOS PREVIOS:

Ninguno

■ RECOMENDACIONES:

Se recomienda haber superado las materias básicas *Física General*, *Matemáticas*, *Química General*, *Operaciones básicas de laboratorio* e *Informática aplicada a la Química* y la asignatura *Química Física I* del módulo fundamental.



IV.- CONTENIDOS

■ BREVE DESCRIPCIÓN DE LOS CONTENIDOS:

Complementos de termodinámica. Termodinámica estadística. Fuerzas intermoleculares. Gases reales y fases condensadas. Teoría cinética y fenómenos de transporte. Cinética química. Mecanismos de reacción. Aproximaciones moleculares. Catálisis homogénea. Superficies e interfase. Tensión superficial. Sistemas multicomponentes. Fisisorción y quimisorción. Cinética electroquímica. Catálisis heterogénea. Polímeros y coloides. Síntesis y caracterización. Materiales poliméricos.

■ PROGRAMA:

TEMA I. Complementos de termodinámica

Lección 1: Potenciales termodinámicos

Formulación diferencial de la termodinámica. Ecuación fundamental. Potenciales termodinámicos (U, H, A, G). Relaciones de Maxwell. Coeficientes térmicos. Criterios de equilibrio y espontaneidad.

Lección 2: Sistemas multicomponentes

Magnitudes molares parciales. Potencial químico. Ecuación de Gibbs-Duhem. La energía Gibbs de una mezcla. Potencial químico de un gas ideal. Potencial químico de un gas real: fugacidad. Potencial químico de un gas ideal en una mezcla de gases ideales. Magnitudes termodinámicas de mezcla.

Lección 3: Disoluciones de no electrolitos

Disoluciones ideales: ley de Raoult y ley de Henry. Potencial químico de un componente en una disolución ideal. Disoluciones reales. Potencial químico de un componente en una disolución real. Estados de referencia. Actividad y coeficiente de actividad. Funciones termodinámicas de mezcla y de exceso.

Lección 4: Disoluciones de electrolitos

Disoluciones de electrolitos. Potencial químico de un componente en una disolución de electrolitos. Estados de referencia. Actividad y coeficiente de actividad. Ecuación de Debye-Hückel. Electroquímica de equilibrio.

Tutorías dirigidas 1 y 2

Laboratorio 1: Propiedades molares parciales I.

Laboratorio 2: Propiedades molares parciales II.

TEMA II. Termodinámica Estadística

Lección 5: El colectivo canónico

Descripción mecanocuántica de un microestado, degeneración. Postulado de Boltzmann. Probabilidad canónica de un microestado. Función de partición canónica. Relación entre energía Gibbs y función de partición canónica. Ejemplos de funciones de partición sencillas.

**Lección 6: Sistemas no interaccionantes**

Función de partición molecular: caso de partículas distinguibles e indistinguibles. Gas monoatómico: funciones de partición nuclear, electrónica y traslacional. Gas diatómico: funciones de partición rotacional y vibracional. Energía, entropía y capacidad calorífica de gases. Límite de alta temperatura, principio de equipartición.

Lección 7: Mezclas de gases no interaccionantes

Función de partición multicomponente. Entropía de mezcla. Constantes de equilibrio.

Lección 8: Fuerzas intermoleculares. Gases reales y fases condensadas

Interacciones coulombicas. Interacciones multipolares, dipolo eléctrico. Interacciones de inducción y dispersión. Potenciales empíricos: esferas duras, pozo cuadrado, Lennard-Jones. Función de partición clásica: Integral de configuración. Segundo coeficiente del virial. Ecuación de van der Waals. Diagramas de fases. Punto crítico.

Tutorías dirigidas 3 y 4

Laboratorio 3: *Gases Reales I.*

Laboratorio 4: *Gases Reales II.*

TEMA III. Teoría cinética y transporte**Lección 9: Teoría cinética de los gases**

Distribución de Maxwell–Boltzmann de velocidades. Velocidad más probable, velocidad media y velocidad cuadrática media. Frecuencia de colisión y recorrido libre medio. Flujos moleculares. Difusión y efusión. Propiedades de transporte: flujos y gradientes. Ley de Fick y coeficiente de autodifusión de gases. Transporte de momento, viscosidad. Conductividad térmica.

Lección 10: Transporte en fases condensadas

Desplazamiento cuadrático medio y coeficiente de autodifusión. Movimiento browniano. Viscosidad y conductividad térmica. Transporte en sólidos. Conductividad en disoluciones de electrolitos. Movilidad iónica. Leyes de Kohlrausch.

Tutoría dirigidas 5 y 6

Laboratorio 5: *Teoría cinética de gases.*

Laboratorio 6: *Conductimetría.*

TEMA IV. Cinética Química**Lección 11: Cinética formal**

Aspectos avanzados de cinética formal. Métodos experimentales para la determinación de velocidades de reacción.

Lección 12: Reacciones complejas

Mecanismos de reacción: reacciones reversibles, paralelas y consecutivas. Aproximaciones del estado estacionario y de la etapa limitante. Reacciones unimoleculares. Mecanismo de Lindemann. Reacciones termoleculares. Reacciones en cadena. Explosiones.

**Lección 13: Catálisis homogénea**

Mecanismo general de catálisis. Catálisis ácido-base. Autocatálisis.

Lección 14: Teorías de las velocidades de reacción

Teoría de colisiones de esferas rígidas: colisiones moleculares. Sección eficaz reactiva. Modelo de la línea de los centros. Teoría del Estado de Transición: superficies de energía potencial. Camino de reacción. Postulados fundamentales y coeficiente cinético. Formulación termodinámica.

Lección 15: Cinética de reacciones en disolución

Propiedades generales de las reacciones en disolución. Reacciones controladas por difusión. Teoría del Estado de Transición en reacciones en disolución.

Lección 16: Fotoquímica

Cinética fotoquímica. Rendimiento cuántico. Desactivación colisional. Ecuación de Stern-Volmer. Reacciones fotoquímicas en la troposfera y estratosfera.

Tutorías dirigidas 7-9

Laboratorio 7: *Cinética de reacción por espectrofotometría.*

Laboratorio 8: *Catálisis homogénea.*

TEMA V. Superficies e interfases**Lección 17: Termodinámica de la interfase líquido vapor**

Definición de interfase y tensión superficial. Interfases curvas. Ecuación de Young-Laplace. Ángulo de contacto. Capilaridad. Ecuación de Kelvin. Sistemas multicomponentes. Propiedades superficiales de exceso. Isoterma de Gibbs. Tipos de solutos. Isoterma de Langmuir, monocapas, presión superficial, ecuación de estado.

Lección 18: Superficies sólidas

Estructura de una superficie sólida. Interfase sólido-gas. Adsorción. Fisisorción y quimisorción. Fracción de recubrimiento. Isotermas experimentales de adsorción. Modelo BET. Significado de la constante C. Cálculo de la superficie específica de un sólido. Quimisorción. Isoterma de Langmuir. Otras isotermas (Freundlich, Temkin). Calores isostéricos. Introducción a la catálisis heterogénea.

Lección 19: Interfase electrificada

Interfase electrodo disolución (interfases electrificadas). Ecuación de Gibbs-Lippmann. Electrocapilaridad. Modelos de doble capa: Helmholtz, Gouy-Chapman, Stern. Cinética electrodo. Sobrepotencial. Densidad de corriente de intercambio. Electroodos polarizables y no polarizables.

Tutorías dirigidas 10 y 11

Laboratorio 9: *Tensión superficial de disoluciones. Ecuación de Gibbs.*

Laboratorio 10: *Isoterma de adsorción.*

**TEMA VI. Polímeros y coloides****Lección 20: Propiedades y síntesis de polímeros**

Introducción, conceptos básicos. Polidispersidad. Pesos moleculares. Flexibilidad y dimensiones. Síntesis de polímeros. Reacciones en etapas y reacciones en cadena.

Lección 21: Disoluciones de polímeros y su caracterización

Termodinámica de disoluciones poliméricas. Temperatura Θ . Caracterización de polímeros. Dispersión de luz, viscosidad, osmometría.

Lección 22: Estado coloidal y autoorganización

Naturaleza del estado coloidal. Micelas. Determinación experimental de la concentración micelar crítica.

Tutoría dirigida 12

Laboratorio 11: *Polimerización I.*

Laboratorio 12: *Polimerización II.*

Laboratorio 13: *Caracterización de disoluciones poliméricas por viscosimetría I.*

Laboratorio 14: *Caracterización de disoluciones poliméricas por viscosimetría II.*

Laboratorio 15: *Determinación de concentraciones micelares críticas.*

V.- COMPETENCIAS**■ GENERALES:**

Las competencias generales del título, CG1, CG2, CG3, CG5, CG6, CG7, CG8, CG9, CG10, CG11, CG12 y CG13, desarrolladas en el módulo fundamental, CG-MF, y que son de aplicación en esta asignatura son las siguientes:

- **CG1-MF1:** Reconocer los procesos químicos en la vida diaria.
- **CG2-MF1:** Relacionar la Química con otras disciplinas.
- **CG3-MF1:** Continuar sus estudios en áreas multidisciplinares.
- **CG5-MF1:** Demostrar el conocimiento y comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionadas con las áreas de la Química.
- **CG6-MF1:** Analizar y resolver problemas cualitativos y cuantitativos.
- **CG7-MF1:** Reconocer y analizar nuevos problemas y planear estrategias para solucionarlos.
- **CG8-MF1:** Consultar y utilizar información científica y técnica de forma eficaz.
- **CG9-MF1:** Demostrar conocimientos sobre materiales de laboratorio y habilidades prácticas.
- **CG10-MF1:** Manipular con seguridad materiales químicos.
- **CG10-MF2:** Reconocer y valorar los riesgos en el uso de sustancias químicas y procedimientos de laboratorio.
- **CG11-MF1:** Manejar instrumentación química estándar.



- **CG12-MF1:** Interpretar datos procedentes de observaciones y medidas en el laboratorio.
- **CG13-MF1:** Reconocer e implementar buenas prácticas científicas de medida y experimentación.

■ ESPECÍFICAS:

Las competencias específicas de la Materia Química Física que son de aplicación en esta asignatura son las siguientes:

- **CE11-MFQF1:** Utilizar los conocimientos teóricos y experimentales necesarios para abordar el comportamiento macroscópico de la materia a través de la aplicación de los principios de la Termodinámica Química, y su relación con las propiedades microscópicas a través de los principios de la Termodinámica Estadística.
- **CE11-MFQF3:** Relacionar las propiedades macroscópicas y las propiedades de átomos y moléculas individuales, incluyendo macromoléculas, polímeros, coloides y otros materiales.
- **CE13-MFQF1:** Utilizar los conocimientos teóricos necesarios para enjuiciar los cambios asociados a las reacciones químicas en términos de mecanismos de reacción y ecuaciones de velocidad, así como las habilidades prácticas necesarias para la cuantificación experimental de estos procesos.
- **CE13-MFQF2:** Describir conocimientos básicos de los fenómenos electroquímicos y sus aplicaciones tecnológicas.

■ TRANSVERSALES:

Las competencias transversales del título, CT1, CT2, CT3, CT5, CT6, CT7, CT11 y CT12, desarrolladas en el modulo fundamental, CT-MF, y que son de aplicación en esta asignatura son las siguientes:

- **CT1-MF1** Elaborar y escribir informes de carácter científico y técnico.
- **CT2-MF1** Cooperar con otros estudiantes mediante el trabajo en equipo.
- **CT3-MF1** Aplicar el razonamiento crítico y autocrítico.
- **CT5-MF1** Utilizar información química, bibliografía y bases de datos especializadas.
- **CT6-MF1** Identificar la importancia de la química en el contexto industrial, medioambiental y social.
- **CT7-MF1** Utilizar herramientas y programas informáticos para el tratamiento de resultados experimentales.
- **CT11-MF1** Desarrollar el aprendizaje autónomo.
- **CT12-MF1** Reconocer la problemática energética actual y su importancia.
- **CT12-MF2** Desarrollar la sensibilidad por temas medioambientales.



VI. – RESULTADOS DEL APRENDIZAJE

Una vez superada esta asignatura el alumno deberá ser capaz de:

Lección 1

1. Definir los potenciales termodinámicos A (energía de Helmholtz) y G (energía de Gibbs).
2. Aplicar la variación de energía G para predecir la espontaneidad o equilibrio de procesos a temperatura y presión constantes.
3. Utilizar las relaciones de Maxwell para deducir relaciones entre magnitudes termodinámicas.
4. Calcular la variación de entropía de un gas ideal o de van der Waals en cualquier proceso.
5. Utilizar los coeficientes térmicos para explicar los cambios relativos de volumen a temperatura o presión constantes de un gas ideal.
6. Explicar en qué condiciones un sistema cambia su energía de Helmholtz, si esa variación es igual al trabajo máximo.

Lección 2

7. Explicar desde un punto de vista matemático la aditividad de las propiedades molares parciales en una mezcla.
8. Definir el potencial químico de un gas real utilizando el estado de referencia.
9. Explicar que la variación del potencial químico de un componente de una mezcla no puede ser independiente del potencial químico del resto de los componentes a temperatura y presión constantes.

Lección 3

10. Expresar el potencial químico de un componente en disolución en función de las actividades para diferentes estados de referencia.
11. Calcular coeficientes de actividad de componentes en disolución.
12. Deducir y evaluar la dependencia con la temperatura de la solubilidad de un sólido en un líquido.
13. Deducir y evaluar constantes de equilibrio en disoluciones en función de los coeficientes de actividad.
14. Calcular propiedades de mezcla y de exceso de disoluciones y relacionarlas con los coeficientes de actividad.

Lección 4

15. Definir el concepto de electrolito en disolución.
16. Diferenciar entre actividad y coeficiente de actividad en disoluciones reales y disoluciones de electrolitos.
17. Explicar la teoría de Debye-Hückel a partir del concepto de fuerza iónica del medio.
18. Relacionar los procesos electroquímicos con el concepto de equilibrio en disolución.

**Lección 5**

19. Aplicar los conceptos de probabilidad en el contexto de la termodinámica estadística.
20. Deducir la distribución de Boltzmann.
21. Explicar el carácter probabilístico de la entropía.
22. Aplicar la distribución de Boltzmann a sistemas de interés químico.
23. Expresar las propiedades termodinámicas a partir de la distribución de la función de partición canónica.
24. Calcular las propiedades termodinámicas de sistemas simples a partir de las propiedades moleculares (función de partición).

Lección 6

25. Utilizar el concepto de sistema no-interaccionante y las simplificaciones que resultan de ello a efectos de evaluar la función de partición.
26. Relacionar propiedades moleculares precisas con sus correspondientes funciones de partición y su efecto en las propiedades termodinámicas de las sustancias.
27. Aplicar la factorización de funciones de partición en términos de contribuciones moleculares separables.
28. Distinguir entre las estadísticas cuánticas y clásicas y conocer la relación de alta temperatura entre las mismas.

Lección 7

29. Expresar la función de partición de una mezcla de gases no-interaccionantes en términos de funciones de partición de especies puras.
30. Describir el origen combinatorial de la entropía de mezcla.
31. Explicar los factores entrópicos y energéticos que determinan las constantes de equilibrio de la reacción química.
32. Expresar constantes de equilibrio de reacciones químicas sencillas en términos de propiedades moleculares.

Lección 8

33. Nombrar los tipos de fuerzas intermoleculares que puede presentar una molécula a partir de su geometría.
34. Explicar la dependencia con la distancia de las distintas fuerzas intermoleculares.
35. Comparar los puntos de fusión y ebullición de distintas sustancias en base a sus fuerzas intermoleculares.
36. Describir las expresiones matemáticas de los potenciales empíricos más utilizados.
37. Calcular la ecuación de estado de un gas real a partir del potencial intermolecular y la función de partición configuracional para casos sencillos.
38. Describir y utilizar las ecuaciones de estado semiempíricas más utilizadas.
39. Calcular el segundo coeficiente del virial a partir del potencial de interacción para casos sencillos.

Lección 9

40. Explicar la forma de las funciones de distribución de velocidad y energía de Maxwell-Boltzmann y su dependencia con la temperatura y la masa molecular.
41. Calcular la velocidad media, la velocidad más probable y la velocidad cuadrática media de un gas a partir de la temperatura y la masa molecular.



42. Relacionar el teorema de equipartición de la energía para un gas ideal con la ecuación de estado.
43. Calcular la frecuencia de colisiones moleculares, frecuencia total y recorrido libre medio de gases puros y mezclas.
44. Aplicar los conceptos de difusión y efusión molecular a sistemas sencillos.
45. Calcular los coeficientes de transporte a partir de los parámetros de la teoría cinética.

Lección 10

46. Relacionar la viscosidad y conductividad térmica de gases reales y fluidos con la temperatura y la presión del sistema.
47. Definir el concepto de desplazamiento cuadrático medio y coeficiente de difusión en gases reales y fluidos densos.
48. Aplicar las ecuaciones de Einstein-Smoluchowski y Stokes-Einstein para determinar el coeficiente de difusión en fluidos densos.
49. Analizar el concepto de movimiento browniano a partir del fenómeno de difusión en fases condensadas.
50. Inferir el fenómeno de difusión en sólidos a partir de las características cristalinas del sistema.
51. Analizar el concepto de conductancia y conductividad molar para determinar la movilidad de iones en disolución.
52. Aplicar las leyes de Kohlrausch en la determinación de la conductividad molar límite de una disolución de electrolitos.

Lección 11

53. Aplicar los conceptos de velocidad de reacción, orden de reacción, ecuación elemental y molecularidad en el contexto de una reacción química.
54. Determinar el orden de una reacción, su ley de velocidad y la constante de velocidad de reacción a partir de datos experimentales para reacciones simples.
55. Describir los diferentes métodos experimentales para la determinación de velocidades de reacción.

Lección 12

56. Deducir una ley de velocidad a partir de un mecanismo de reacción.
57. Determinar las ecuaciones integradas de velocidad en reacciones complejas: reacciones reversibles, paralelas y consecutivas.
58. Utilizar la aproximación del estado estacionario y de la etapa limitante en una reacción compleja.
59. Aplicar el mecanismo de Lindemann de las reacciones unimoleculares.
60. Describir las distintas etapas de las reacciones en cadena lineal y en cadena ramificada, e identificarlas en distintos ejemplos.
61. Explicar los mecanismos que conducen a las reacciones explosivas.

Lección 13

62. Explicar el papel desempeñado por un catalizador en una reacción química.
63. Explicar la catálisis homogénea y, en particular, la protagonizada por ácidos y bases.



64. Expresar la ecuación de velocidad de la reacción incluyendo los términos en que interviene el catalizador.
65. Describir la autocatálisis y sus consecuencias.

Lección 14

66. Calcular la constante de velocidad de las reacciones bimoleculares en fase gaseosa a partir de las colisiones moleculares.
67. Utilizar las superficies de energía potencial y las trayectorias o camino de reacción para predecir el estado de transición de una reacción bimolecular.
68. Calcular la constante de velocidad de una reacción bimolecular en fase gaseosa a partir de las funciones de partición de los reactivos y del complejo activado.
69. Explicar la predicción de las magnitudes termodinámicas de una reacción a partir de la teoría del estado de transición.

Lección 15

70. Describir los distintos tipos de reacciones en disolución.
71. Utilizar el efecto celda o jaula para explicar las reacciones en disolución.
72. Utilizar los coeficientes de difusión para predecir la constante de velocidad de una reacción controlada por difusión.
73. Describir el papel de la fuerza iónica en las reacciones en disolución.

Lección 16

74. Calcular la velocidad de reacciones fotoquímicas sencillas.
75. Definir el rendimiento cuántico de un determinado proceso fotofísico o fotoquímico a partir de la velocidad del proceso y la intensidad de luz absorbida.
76. Aplicar la ecuación de Stern-Volmer para determinar la constante de desactivación colisional de un proceso fotofísico.
77. Explicar el papel de las etapas fotoquímicas y la catálisis homogénea en las reacciones que tienen lugar en la troposfera y estratosfera.

Lección 17

78. Definir la tensión interfacial y, en particular, la tensión superficial.
79. Predecir el mojado en función de un balance de tensiones superficiales.
80. Explicar los fenómenos de ascenso/descenso capilar y de nucleación de un líquido en un vapor a partir de la ecuación de Young-Laplace.
81. Relacionar la concentración superficial de exceso de un soluto con su capacidad para modificar la tensión superficial de la disolución.
82. Describir el comportamiento termodinámico de la interfase líquido-vapor para disoluciones de solutos tensioactivos mediante ecuaciones de estado superficiales.

Lección 18

83. Describir la adsorción de un gas sobre la superficie de un sólido y reconocer las diferencias entre fisisorción y quimisorción.
84. Reconocer los distintos tipos de isothermas de adsorción y describir la quimisorción con el modelo de Langmuir y con ecuaciones empíricas (Temkin y Freundlich) y la fisisorción con el modelo BET para superficies uniformes no porosas.



85. Calcular el área de una superficie sólida y la entalpía de adsorción a partir de datos experimentales de cantidad de sustancia adsorbida utilizando el modelo BET.
86. Calcular la entalpía de adsorción isostérica a partir de datos experimentales adecuados.
87. Relacionar la quimisorción con los procesos de catálisis heterogénea.

Lección 19

88. Describir los diferentes modelos para la doble capa eléctrica en una interfase electrificada.
89. Interpretar una curva electrocapilar.
90. Determinar la variación de la densidad de carga superficial y la capacidad eléctrica con el potencial aplicado.
91. Aplicar la ecuación de Butler-Volmer para determinar la densidad de corriente a partir del sobrepotencial.

Lección 20

92. Reconocer conceptos básicos específicos de polímeros, y su clasificación.
93. Explicar las implicaciones de la polidispersidad, y calcular los promedios del peso molecular.
94. Explicar los conceptos de flexibilidad y rigidez de cadenas, y calcular las dimensiones promedio.
95. Distinguir los diferentes mecanismos de síntesis de polímeros lineales, y calcular sus velocidades de reacción.
96. Calcular los pesos moleculares promedio en función del tiempo en polimerizaciones por pasos.
97. Calcular los pesos moleculares y las masas de polímero obtenidas en polimerizaciones en cadena.

Lección 21

98. Manejar la teoría de Flory-Huggins para determinar la posible formación de disoluciones de polímeros.
99. Relacionar la temperatura “theta” con la calidad del disolvente y el parámetro de interacción de Flory.
100. Utilizar las medidas de presión osmótica para determinar pesos moleculares promedio en número.
101. Utilizar los datos de dispersión de luz para calcular pesos moleculares promedio en peso.
102. Determinar experimentalmente viscosidades intrínsecas para calcular el peso molecular promedio viscoso.

Lección 22

103. Describir los conceptos de micelas y coloides, sus tipos y clasificación.
104. Determinar experimentalmente la concentración micelar crítica de un tensioactivo.



VII. – HORAS DE TRABAJO Y DISTRIBUCIÓN POR ACTIVIDAD

| Actividad | Presencial (horas) | Trabajo autónomo (horas) | Créditos |
|------------------------------------|--------------------|--------------------------|-----------|
| Clases teóricas | 45 | 80 | 5 |
| Seminarios | 15 | 20 | 1,4 |
| Tutorías / Trabajos dirigidos | 12 | 18 | 1,2 |
| Prácticas de laboratorio | 50 | 37,5 | 3,5 |
| Preparación de trabajos y exámenes | 10 | 12,5 | 0,9 |
| Total | 132 | 168 | 12 |

VIII.- METODOLOGÍA

Los contenidos de la asignatura se presentan a los alumnos en clases presenciales, divididas en dos tipos:

Las denominadas **clases presenciales de teoría** se impartirán al grupo completo y en ellas se darán a conocer al alumno los contenidos fundamentales de la asignatura. Al comienzo de cada tema se expondrán claramente el programa y los objetivos principales del mismo. Al final del tema se hará un breve resumen de los conceptos más relevantes y se plantearán nuevos objetivos que permitirán interrelacionar contenidos ya estudiados con los del resto de la asignatura y con otras asignaturas afines. Durante la exposición de contenidos se propondrán problemas que ejemplifiquen los conceptos desarrollados o que sirvan de introducción a nuevos contenidos. Para facilitar la labor de seguimiento por parte del alumno de las clases presenciales se le proporcionará el material docente necesario, bien en fotocopia o en el Campus Virtual.

En las **clases presenciales de seminarios** se resolverán ejercicios y cuestiones que ejemplifiquen los contenidos desarrollados en las clases de teoría. Periódicamente se suministrará al alumno una relación de dichos problemas/ejercicios con el objetivo de que intente su resolución previa a las clases, lo que incluirá en algunos casos la consulta de información científica. El proceso de resolución de estos problemas se llevará a cabo mediante diferentes métodos; algunos ejercicios serán recogidos por el profesor para su evaluación. Estas clases de teoría y seminario y el trabajo que conllevan desarrollan las competencias generales CG6-MF1, CG7-MF1 y CG8-MF1 y las transversales CT1-MF1, CT2-MF1, CT3-MF1, CT5-MF1 y CT7-MF1.

Durante el desarrollo del temario, tanto en las clases presenciales de teoría como en las de seminarios, el alumno adquirirá los conocimientos y la experiencia necesarios para satisfacer todas las competencias específicas a cubrir, CE11-MFQF1, CE11-MFQF3, CE13-MFQF1 y CE13-MFQF2 y la transversal CT11-MF1. Además, durante el desarrollo de las sesiones se hará especial énfasis en relacionar los aspectos estudiados con otras disciplinas y fenómenos químicos en la vida diaria, así como en su carácter



multidisciplinar, lo que satisfará las competencias generales CG1-MF1, CG2-MF1 y CG3-MF1, y las transversales CT12-MF1 y CT12-MF2

En las clases de **tutorías dirigidas** se propondrán y se resolverán ejercicios tanto sobre temas directamente relacionados con los contenidos teóricos, como sobre temas más aplicados. Como complemento al trabajo personal realizado por el alumno y para potenciar el desarrollo del trabajo en grupo, se propondrán temas para la **elaboración y presentación de trabajos***. Todo ello permitirá que el alumno ponga en práctica sus habilidades en la obtención de información, desarrollando habilidades relacionadas con la utilización crítica de información bibliográfica y bases de datos y el trabajo en equipo (CT2-MF1, CT3-MF1 y CT5-MF1). Además, cada grupo de trabajo podrá evaluar, de forma anónima, el tema desarrollado por otro grupo, de manera análoga a la revisión entre pares propia de las publicaciones científicas, lo que desarrollará el sentido crítico y autocrítico contemplado en la competencia transversal CT3-MF1. El proceso de evaluación servirá para que los alumnos desarrollen capacidades de análisis crítico de trabajos científicos y sean capaces de corregir en sus propias elaboraciones los defectos que encuentren en los trabajos que evalúen.

También estarán disponibles tutorías para alumnos que de manera individual deseen resolver las dudas que surjan durante el estudio. Estas tutorías se realizarán de forma presencial en los horarios indicados por cada profesor o, excepcionalmente, de modo virtual.

Se utilizará el Campus Virtual para permitir una comunicación fluida entre profesores y alumnos y como instrumento para poner a disposición de los alumnos el material que se utilizará en las clases tanto teóricas como de problemas y en las prácticas de laboratorio. También podrá utilizarse como foro en el que se presenten algunos temas complementarios cuyo contenido, aunque importante en el conjunto de la materia, no se considere oportuno presentarlo en las clases presenciales. Por último, esta herramienta permitirá realizar ejercicios de autoevaluación mediante pruebas objetivas de respuesta múltiple de corrección automática, que permiten mostrar tanto al profesor como al alumno qué conceptos necesitan de un mayor trabajo para su aprendizaje.

Se realizará un **laboratorio** durante todo el curso con temáticas directamente relacionadas con los contenidos de la asignatura. Este laboratorio constará tanto de prácticas experimentales, donde se desarrollen específicamente las competencias generales (CG9-MF1, CG10-MF1, CG10-MF2, CG11-MF2, CG12-MF1 y CG13-MF1), como de prácticas de cálculo y de utilización de herramientas teóricas en las que se desarrollarán las competencias específicas (CE11-MFQF1, CE11-MFQF3, CE13-MFQF1 y CE13-MFQF2). El alumno presentará informes científicos individuales y en grupo de algunas de las prácticas realizadas. En estos informes el alumno describirá el trabajo realizado incluyendo un razonamiento crítico acerca de los métodos utilizados y la calidad de los resultados obtenidos. (CT1-MF1, CT2-MF1, CT3-MF1, CT5-MF1, CT7-MF1).

*El trabajo en grupo se llevará a cabo de forma rotatoria cada curso en una asignatura distinta de tercero de grado.



IX.- BIBLIOGRAFÍA

■ BÁSICA:

- *Química Física*, P. Atkins, J. de Paula, 8ª Edición, Editorial Médica Panamericana, Buenos Aires, 2008.

■ COMPLEMENTARIA:

- *Química Física*, Volúmenes I y II. J. Bertrán Rusca y J. Núñez Delgado (coord.). Ariel Ciencia, 2002.
- *Química Física*, T. Engel, P. Reid, Pearson Addison Wesley, Madrid, 2006.
- *Fisicoquímica*, I.N. Levine, 5ª Edición, McGraw Hill/Interamericana de España, Madrid, 2004.
- *Physical Chemistry*, R. S. Berry, S. A. Rice, J. Ross, 2nd Edition, Oxford University Press, New York, 2000.
- *Physical Chemistry: A Molecular Approach*, D. A. McQuarrie y J. D. Simon, University Science Book, 1997.
- *Micelles, Monolayers and Biomembranes*, M. N. Jones y D. Chapman, Edit. J. Wiley & Sons, New York, 1994.
- *The Colloidal Domain*, D. Fennell Evans y H. Wennerström, Edit. Wiley-VCH, New York, 1999.
- *Polymer Science and Technology*, J.R. Fried, Prentice Hall, 1995.
- *Problemas de Química Física*, J. Bertrán Rusca y J. Núñez Delgado (coord.). Delta Publicaciones, 2007.

X.- EVALUACIÓN

El rendimiento académico del alumno y la calificación final de la asignatura se computarán de forma ponderada atendiendo a los porcentajes que se recogen a continuación y que se mantendrán en todas las convocatorias. Con carácter general, para superar la asignatura será necesario alcanzar una nota mínima de 5 sobre 10 en el cómputo total de todas las actividades evaluadas.

■ EXÁMENES ESCRITOS:

65%

Convocatoria de junio: se realizarán dos exámenes parciales y un examen final, comunes a todos los grupos.

Para superar esta convocatoria por parciales será necesario:

- a) Obtener una nota mínima de 10 sobre 20 en la suma de los dos exámenes parciales.
- b) Que en ninguno de los dos parciales la nota obtenida sea inferior a 4 sobre 10.
- c) Que la calificación total ponderada con el resto de actividades sea al menos de 5 sobre 10.

Los alumnos que superen esta convocatoria por parciales, es decir cumplan las condiciones anteriores, no estarán obligados a presentarse al examen final. El resto de los alumnos podrá examinarse de la materia del parcial no superado (parcial-final) o de la totalidad de la asignatura en el examen final de junio. Para poder optar por la modalidad de examen parcial-final en junio es necesario que el alumno haya obtenido



una nota mínima de 5 en el parcial del que no se examina y una nota superior a 2 sobre 10 en el parcial del que se examina.

Todos los exámenes, parciales, finales y parcial-final de junio constarán de preguntas y problemas sobre los contenidos de la asignatura, tanto de las clases teóricas y seminarios como de las tutorías dirigidas y laboratorios. En el examen de junio, los alumnos que se presenten únicamente a un parcial, por tener el otro aprobado, realizarán un examen equivalente, en número de preguntas y duración, a los que se presenten al examen final.

En la convocatoria de septiembre se realizará un único examen final semejante al realizado en la convocatoria de junio. Quienes no aprueben la asignatura en junio deberán examinarse de todo el temario.

En cualquier caso, la nota mínima del examen final necesaria para superar la asignatura, tanto de junio como de septiembre, es de 4 sobre 10.

Competencias evaluadas:

CG1-MF1, CG2-MF1, CG3-MF1, CG5-MF1, CG6-MF1, CG7-MF1, CG8-MF1
CT1-MF1, CT2-MF1, CT3-MF1, CT5-MF1, CT7-MF1, CT11-MF1, CT12-MF1 y
CT12-MF2
CE11-MFQF1, CE11-MFQF3, CE13-MFQF1 y CE13-MFQF2

■ TRABAJO PERSONAL: 15%

La evaluación del trabajo de aprendizaje individual realizado por el alumno se llevará a cabo teniendo en cuenta los siguientes factores:

- Destreza del alumno en la resolución de los problemas y ejercicios propuestos, que se recogerán periódicamente en las clases presenciales.
- Valoración del trabajo en las clases presenciales de problemas.
- Valoración del trabajo realizado durante las tutorías en grupo programadas, de asistencia obligatoria, y a las cuales serán citados los alumnos periódicamente a lo largo del cuatrimestre.
- Valoración de los trabajos propuestos en las tutorías programadas y realizados individualmente o en grupo por los alumnos.

La nota obtenida en el trabajo personal no será tomada en cuenta en la calificación final de la asignatura si no se ha alcanzado una nota mínima de 5,0 en este apartado.

Competencias evaluadas:

CG1-MF1, CG2-MF1, CG3-MF1, CG5-MF1, CG6-MF1, CG7-MF1, CG8-MF1
CE11-MFQF1, CE11-MFQF3, CE13-MFQF1 y CE13-MFQF2
CT2-MF1, CT3-MF1, CT5-MF1, CT6-MF1, CT11-MF1

■ LABORATORIO: 20%

Los alumnos desarrollarán en grupos reducidos a lo largo del curso una serie de prácticas de laboratorio, tanto de carácter experimental como de cálculo y de utilización de herramientas teóricas, siendo la asistencia a estas prácticas **obligatoria**. Se valorará la actitud general de los alumnos en el laboratorio, su trabajo durante las sesiones de prácticas, la obtención por el alumno de habilidades teórico-prácticas, así



como la destreza en la utilización de los equipos experimentales y en el manejo de paquetes informáticos de tratamiento de datos y modelización molecular. Los alumnos estarán obligados a mantener un cuaderno de laboratorio, individual, que será objeto de corrección y evaluación cuatrimestral. Independientemente del cuaderno, durante el desarrollo del laboratorio, los profesores encargarán discrecionalmente algunos ejercicios o elaboraciones de datos del laboratorio que serán entregados en el plazo que se establezca. Tanto el cuaderno como los ejercicios serán objeto de evaluación y su entrega obligatoria.

El alumno no será calificado en el laboratorio si la nota individual de cuatro o más prácticas fuese inferior a 5 sobre 10. Se realizará un examen específico del laboratorio que será considerado como un 20% de la calificación del laboratorio. En cualquier caso, la nota mínima de laboratorio necesaria para superar la asignatura es de 4 sobre 10.

Los alumnos que no alcancen en junio la nota mínima para superar el laboratorio, y superen la calificación mínima en los exámenes escritos, podrán realizar en septiembre un examen de laboratorio, siempre que hayan asistido a todas las prácticas y entregado el cuaderno de laboratorio.

En aquellos casos en que un estudiante suspenda la asignatura pero haya superado las actividades presenciales del laboratorio, la nota de éstas se le mantendrá durante un año, debiendo hacerse, sin embargo, un examen de los contenidos del laboratorio para poder aprobar la asignatura.

Competencias evaluadas:

CG9-MF1, CG10-MF1, CG10-MF2, CG11-MF2 CG12-MF1 y CG13-MF1
CE11-MFQF1, CE11-MFQF3, CE13-MFQF1 y CE13-MFQF2
CT1-MF1, CT2-MF1, CT3-MF1, CT5-MF1, CT7-MF1

■ ASISTENCIA Y PARTICIPACIÓN ACTIVA EN LAS CLASES:

La asistencia a todas las actividades presenciales es **obligatoria**, y la participación activa del alumno en todas las actividades docentes se valorará positivamente en la calificación final.



PLANIFICACIÓN DE ACTIVIDADES – CRONOGRAMA

| TEMA | ACTIVIDAD | HORAS | GRUPOS | INICIO | FIN |
|------------------------------------------|---------------------|-------|--------|------------|------------|
| I. Complementos de termodinámica | Clases Teoría | 8 | 1 | 1ª Semana | 6ª Semana |
| | Clases Problemas | 4 | 1 | | |
| | Tutoría programada* | 3 | 2 | | |
| | Laboratorio | 6 | 4 | | |
| II. Termodinámica Estadística | Clases Teoría | 8 | 1 | 6ª Semana | 12ª Semana |
| | Clases Problemas | 3 | 1 | | |
| | Tutoría programada | 2 | 2 | | |
| | Laboratorio | 6 | 4 | | |
| III. Teoría cinética y transporte | Clases Teoría | 5 | 1 | 12ª Semana | 15ª Semana |
| | Clases Problemas | 2 | 1 | | |
| | Tutoría programada | 1 | 2 | | |
| | Laboratorio | 6 | 4 | | |
| IV. Cinética Química | Clases Teoría | 10 | 1 | 16ª Semana | 22ª Semana |
| | Clases Problemas | 4 | 1 | | |
| | Tutoría programada | 3 | 2 | | |
| | Laboratorio | 7 | 4 | | |
| V. Superficies e interfases | Clases Teoría | 9 | 1 | 23ª Semana | 28ª Semana |
| | Clases Problemas | 2 | 1 | | |
| | Tutoría programada | 2 | 2 | | |
| | Laboratorio | 7 | 4 | | |
| VI. Polímeros y coloides | Clases Teoría | 4 | 1 | 28ª Semana | 30ª Semana |
| | Clases Problemas | 1 | 1 | | |
| | Tutoría programada | 1 | 2 | | |
| | Laboratorio | 18 | 4 | | |
| PLANIFICACIÓN POR GRUPO DE TEORÍA | | | | | |

*La programación de las tutorías depende de la planificación global de todas las asignaturas del curso.



RESUMEN DE LAS ACTIVIDADES

| Actividad docente | Competencias asociadas | Actividad Profesor | Actividad alumno | Procedimiento de evaluación | P | NP | Total | C |
|--------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|----|-------|-----|
| Clases de teoría | CG1-MF1, CG2-MF1, CG3-MF1, CG6-MF1, CG7-MF1, CG8-MF1, CT1-MF1, CT2-MF1, CT3-MF1, CT5-MF1, CT7-MF1, CT11-MF1, CT12-MF1, CT12-MF2, CE11-MFQF1, CE11-MFQF3, CE13-MFQF1, CE13-MFQF2 | Exposición de conceptos teóricos y planteamiento de cuestiones y nuevos objetivos. | Toma de apuntes. Resolución de cuestiones. Desarrollo de los nuevos objetivos. Formulación de preguntas y dudas. | Calificación de las respuestas realizadas a preguntas relacionadas con los conceptos teóricos. | 45 | 80 | 120 | 15% |
| Seminarios | | Aplicación de la teoría a la resolución de ejercicios numéricos y problemas. Planteamiento de nuevas cuestiones. | Resolución de los ejercicios numéricos, problemas y cuestiones. Formulación de preguntas y dudas. | Calificación de las respuestas (planteamiento y resultado) realizadas para la resolución de ejercicios numéricos y problemas. | 15 | 20 | 35 | |
| Tutorías | | Dirección y supervisión del estudio y actividades del alumno. Planteamiento de cuestiones. Resolución de dudas. | Consulta al profesor sobre las dificultades conceptuales y metodológicas que encuentra al estudiar la materia. Planteamiento de cuestiones y respuesta a las propuestas por el profesor. | No evaluable | | | | |
| Tutorías dirigidas | | Propuesta y valoración crítica de trabajos. Exposición y planteamiento de nuevos objetivos | Cooperación con los compañeros en la elaboración de trabajos. Análisis crítico de los trabajos de otros grupos. Presentación oral del trabajo corregido. Formulación de preguntas y dudas. | Valoración del trabajo, de los análisis realizados y de la presentación. | 12 | 18 | 30 | |



| Actividad docente | Competencias asociadas | Actividad Profesor | Actividad alumno | Procedimiento de evaluación | P | NP | Total | C |
|-------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|------|-------|-----|
| Laboratorio | CG9-MF1, CG10-MF1, CG10-MF2, CG11-MF2, CG12-MF1, CG13-MF1, CT1-MF1, CT2-MF2, CT3-MF3, CT5-MF1, CT7-MF1, CE11-MFQF1, CE11-MFQF3, CE13-MFQF1, CE13-MFQF2 | Aplicación de los contenidos teóricos a problemas prácticos. Desarrollo de habilidades experimentales y de cálculo numérico. Obtención y tratamiento de datos experimentales. Herramientas de modelización molecular. | Preparación, realización y estudio de los contenidos propuestos. Elaboración de una memoria de las prácticas realizadas. | Valoración del trabajo realizado y de los resultados obtenidos. Valoración de la memoria de prácticas presentada. Valoración de las habilidades y conocimientos adquiridos. | 50 | 37,5 | 87,5 | 20% |
| Exámenes | | Propuesta, vigilancia y corrección del examen. Calificación del alumno. | Preparación y realización. | Corrección y valoración de los exámenes. | 10 | 12,5 | 22,5 | 65% |

P : Presenciales; NP: no presenciales (trabajo autónomo); C: calificación