

Química Física III

MÓDULO	MATERIA	CURSO	SEMESTRE	CRÉDITOS	TIPO
Química Física	Química Física	3º	1º	6	Obligatorio
PROFESOR(ES)			DIRECCIÓN COMPLETA DE CONTACTO PARA TUTORÍAS (Dirección postal, teléfono, correo electrónico, etc.)		
José Manuel Sánchez Ruiz			Dpto. Química Física, Facultad de Ciencias: 1ª Planta, despacho nº 10 Correo electrónico: sanchezr@ugr.es		
			HORARIO DE TUTORÍAS		
			Lunes y martes, de 17:00 a 20:00 h.		
GRADO EN EL QUE SE IMPARTE			OTROS GRADOS A LOS QUE SE PODRÍA OFERTAR		
Grado en Química			Grado en Ingeniería Química Grado en Bioquímica		
PRERREQUISITOS Y/O RECOMENDACIONES (si procede)					
Conocimientos básicos de Matemáticas, (especialmente el cálculo diferencial e integral) Física y Química. Aconsejable haber cursado y superado los créditos de las asignaturas previas Química Física I y II.					
BREVE DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS (SEGÚN MEMORIA DE VERIFICACIÓN DEL GRADO)					
Cinética química: cinética formal y cinética molecular. Mecanismos de reacción. Catálisis. Electroquímica: equilibrios iónicos. Conductividad electrolítica. Equilibrios electroquímicos. Cinética electroquímica. Corrosión.					
COMPETENCIAS GENERALES Y ESPECÍFICAS					
Competencias Genéricas: - CG 1: Analizar y sintetizar. - CG 2: Organizar y planificar. - CG3: Comunicarse de forma oral y escrita en la lengua oficial del Grado. - CG5: Gestionar datos y generar información/conocimiento. - CG6: Resolver problemas. - CG7: Adaptarse a nuevas situaciones y tomar decisiones de forma correcta. - CG8: Trabajar en equipo.					



- CG9: Razonar críticamente.
- CG10: Realizar un aprendizaje autónomo para su desarrollo continuo profesional.
- CG11: Demostrar sensibilidad hacia temas medioambientales y sociales.
- CG 12: Mostrar iniciativa y espíritu emprendedor.

Competencias Específicas:

- CE 0: Los fundamentos o principios de otras disciplinas necesarios para las distintas áreas de la Química.
- CE 1: Los aspectos principales de terminología química, nomenclatura, convenios y unidades.
- CE 7: La cinética del cambio químico, incluyendo catálisis e interpretación mecanicista de las reacciones químicas
- CE 13: La relación entre propiedades macroscópicas y propiedades de átomos y moléculas individuales:
- CE 22: Los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionados con todas las áreas de la Química.
- CE 25: Evaluar e interpretar datos e información química.
- CE 27: Aplicar conocimientos químicos adquiridos a la resolución de problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados.
- CE 29: Presentar, tanto de forma escrita como oral, material y argumentación científica a una audiencia especializada.
- CE 30: Utilizar razonadamente las herramientas matemáticas e informáticas para trabajar con datos químicos.
- CE 35: Interpretar los datos procedentes de observaciones y medidas en el laboratorio en términos de su significación y de las teorías que la sustentan.

OBJETIVOS (EXPRESADOS COMO RESULTADOS ESPERABLES DE LA ENSEÑANZA)

- Comprender los fundamentos de la teoría cinética de los gases.
- Comprender los conceptos básicos de la cinética y la distinción entre cinética molecular y formal.
- Comprender los aspectos fundamentales de la cinética del cambio químico, sabiendo determinar ecuaciones cinéticas así como mecanismos de reacción y las relaciones entre ambos.
- Comprender la relación entre constantes cinéticas y de equilibrio.
- Comprender las teorías de las etapas bimoleculares elementales, con especial énfasis en la teoría del estado de transición.
- Interpretar y usar diagramas de energía libre frente a coordenada de reacción.
- Analizar mecanismos complejos de reacción, incluyendo reacciones en cadena.
- Comprender los aspectos del fenómeno de la catálisis, sabiendo distinguir las peculiaridades de la catálisis homogénea, heterogénea y enzimática.
- Comprender los principios básicos del funcionamiento de las células galvánicas y las células electrolíticas.
- Entender el concepto de equilibrio electroquímico y las aplicaciones de las medidas de fuerza electromotriz.
- Comprender los fundamentos electroquímicos del fenómeno de la corrosión de metales y los procedimientos para evitarla.
- Aplicar los conocimientos generales básicos al planteamiento y resolución de cuestiones y problemas.
- Ser capaz de relacionar información experimental con teorías y modelos.



TEMARIO DETALLADO DE LA ASIGNATURA

TEMARIO TEÓRICO:

- **Tema 1. Teoría cinética de los gases**

Introducción.

La interpretación molecular de la presión de un gas.

La distribución de velocidad para las componentes de la velocidad molecular.

Deducción de la ecuación de estado del gas ideal.

Ley de distribución de velocidades moleculares de Maxwell.

Colisiones en fase gaseosa. Frecuencia de colisión. Recorrido libre medio.

Efusión. Ley de Graham.

- **Tema 2. Cinética química formal**

Introducción.

Integración de las ecuaciones cinéticas.

Principio de balance detallado.

Métodos para el estudio experimental de las cinéticas de reacción.

Métodos para el estudio de cinéticas rápidas: flujo detenido y relajación.

Influencia de la temperatura sobre la velocidad de las reacciones químicas.

- **Tema 3. Cinética molecular.**

Introducción.

Modelo de colisiones para las etapas elementales bimoleculares.

Experimentos con haces moleculares. Láseres químicos.

Superficies de energía potencial para una reacción química. Coordenada de reacción.

Planteamiento mecano-estadístico de la teoría del estado de transición.

Formulación termodinámica de la teoría del estado de transición.

Femtoquímica.

- **Tema 4. Mecanismos de reacción.**

Concepto de etapa limitante. Aproximación de equilibrio previo.

Aproximación del estado estacionario. Cambios de etapa limitante.

Reacciones unimoleculares.

Reacciones trimoleculares.

Reacciones de cadena lineal.

Reacciones de cadena ramificada. Explosiones. Límites de explosión.

- **Tema 5. Catálisis**

Introducción

Características generales de la catálisis heterogénea.

Mecanismos tipo Langmuir-Hinshelwood y Eley-Rideal para la catálisis heterogénea.

La fijación industrial del nitrógeno como ejemplo de catálisis heterogénea.

Catálisis homogénea. Catálisis ácido-base general y específica.

Catálisis enzimática. Justificación mecanística de la ecuación de Michaelis-Menten.

- **Tema 6. Células electroquímicas**

La batería ácida de plomo como ejemplo de célula electroquímica.

Modo galvánico y modo electrolítico.

Equilibrio electroquímico. Ecuación de Nernst. Potenciales de electrodo.



Potencial de unión líquida. Puentes salinos.
Aplicaciones de las medidas de fuerza electromotriz.
Células primarias. La célula Daniell y la célula Leclanché.
Células de combustible.

- **Tema 7. Cinética electroquímica y corrosión**

La corrosión acuosa de metales como fenómeno electroquímico.
La termodinámica de la corrosión. Diagramas de Pourbaix. Pasivación.
La cinética de la corrosión. Representación de Tafel.
Protección catódica. Ánodos de sacrificio.
Corrosión galvánica.
Protección anódica.

TEMARIO PRÁCTICO:

Seminarios/Talleres:

- Resolución de problemas numéricos.

BIBLIOGRAFÍA

BIBLIOGRAFÍA FUNDAMENTAL DE TEORÍA:

Atkins. De Paula. Química Física. 8ª Edición. Editorial Médica Panamericana. 2008.
I.N. Levine. Química Física. 5ª Edición. Editorial McGraw Hill. 2004.
Chang. Fisicoquímica. Editorial McGraw Hill. 2008.
M. Díaz Peña y A. Roig Muntaner. Química Física. Vol II. Editorial Alhambra. 1989.
T. Engel, P. Reid y W. Hehre Química Física. Addison Wesley, 2006.
Barrow. Química Física. Ed. Reverté. 1975
McQuarrie, Simon. Physical Chemistry. A molecular approach. University Science Books. 1997.

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA DE TEORÍA:

Castellán. Fisicoquímica. Fondo educativo interamericano.
M. Barnard. Química Física. Ed. Urmo.
Guerasimov & Co. Curso de Química Física. Ed. Mir.
K.J. Laidler (1987). Chemical kinetics. Harper Collins Pub.
A. González Ureña. Cinética Química. Ed. Síntesis, Madrid 2001.
S.R. Logan. Fundamentos de Cinética Física. Ed. Addison Wesley, Madrid 2000.
L. Arnaut, S.J. Formosinho, H. Burrows. Chemical Kinetics. Elsevier, 2006.

BIBLIOGRAFÍA FUNDAMENTAL DE PROBLEMAS:

I.N. Levine. Problemas de Fisicoquímica. 5ª Edición. Editorial McGraw Hill. 2005.

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA DE PROBLEMAS:

Labowitz. Fisicoquímica, problemas y soluciones. Ed. AC.
Bares, Grey & Freid. Colección de problemas de Química Física. Delta Publicaciones, Madrid 2007.
J. Bertrán y J. Nuñez. Problemas de Química Física. Delta publicaciones, Madrid 2007.
A. Requena y A. Bastida. Problemas de Termodinámica, Cinética y Electroquímica. Ibergarceta Publicaciones, Madrid 2009.



ENLACES RECOMENDADOS

<http://bcs.whfreeman.com/pchem8e/>. Página web de Atkins De Paula, Química Física.

http://books.google.es/books/about/Qu%C3%ADmica_f%C3%ADsica.html?hl=es&id=pdJRHwbnnndAC. Vista previa de algunos libros de Química Física.

METODOLOGÍA DOCENTE

- Actividades presenciales. Suponen el 40% del tiempo correspondiente a los créditos ECTS de la asignatura.
 - **Lección magistral** (Clases teóricas-expositivas):
Descripción: Presentación y desarrollo en el aula de los contenidos propuestos.
Propósito: Transmitir dichos contenidos motivando al alumnado a la reflexión, facilitándole el descubrimiento de las relaciones entre diversos conceptos para desarrollarle una mentalidad crítica.
 - **Prácticas clase** (Clases de problemas):
Descripción: actividades a través de las cuales se pretende mostrar al alumnado la forma de aplicar los conocimientos teóricos adquiridos mediante la resolución de ejercicios y problemas numéricos. Los seminarios tratan en profundidad temáticas concretas relacionadas con la materia.
Propósito: desarrollo en el alumnado de las habilidades instrumentales y de las competencias cognitivas y procedimentales
- Actividades no presenciales individuales y grupales. Constituyen el 60% restante del tiempo correspondiente a los ECTS de la asignatura y representan el trabajo personal del alumno para el estudio y preparación de la materia. Pueden ser de dos tipos:
 - **Individuales** (Estudio y trabajo autónomo):
Descripción: 1) estudio individualizado de los contenidos de la materia, 2) actividades propuestas por el profesor (cuestiones de razonamiento, problemas numéricos,...) a través de las cuales y de forma individual se reflexiona y profundiza en los diversos aspectos de la materia, 3) actividades evaluativas (autoevaluaciones,...).
Propósito: favorecer en el estudiante la capacidad para autorregular su aprendizaje, planificándolo, diseñándolo, evaluándolo y adecuándolo a sus especiales condiciones e intereses.
 - **Grupales** (Estudio y trabajo en grupo):
Descripción: 1) actividades (guiadas y no guiadas) propuestas por el profesor a través de las cuales y de forma grupal se profundiza en aspectos concretos de la materia posibilitando a los estudiantes avanzar en la adquisición de determinados conocimientos y procedimientos de la misma.
Propósito: favorecer en los estudiantes la generación e intercambio de ideas, la identificación y análisis de diferentes puntos de vista sobre una temática, la generalización o transferencia de conocimiento y la valoración crítica del mismo.
- **Tutorías académicas:**
Descripción: manera de organizar los procesos de enseñanza y aprendizaje que se basa en la interacción directa entre el estudiante y el profesor.
Propósito: 1) orientar el trabajo autónomo y grupal del alumnado, 2) profundizar en distintos aspectos de la materia y 3) orientar la formación académica integral del estudiante.
El uso de las tutorías de forma continuada puede suponer, en definitiva, una mejora en el rendimiento del trabajo así como una disminución en el tiempo de estudio.

PROGRAMA DE ACTIVIDADES



Primer cuatrimestre	Temas del temario	Actividades presenciales (NOTA: Modificar según la metodología docente propuesta para la asignatura)					Actividades no presenciales (NOTA: Modificar según la metodología docente propuesta para la asignatura)				
		Sesiones teóricas (horas)	Sesiones prácticas (horas)	Exposiciones y seminarios (horas)	Exámenes (horas)	Etc.	Tutorías individuales (horas)	Tutorías colectivas (horas)	Estudio y trabajo individual del alumno (horas)	Trabajo en grupo (horas)	Etc.
Semana 1 (24-28 sep)	1	3					6				
Semana 2 (1-5 oct)	2	3		1			6				
Semana 3 (8-12 oct)	3	3		1			6				
Semana 4 (15-19 oct)	3	1		3			6				
Semana 5 (22-26 oct)	4	3		1			6				
Semana 6 (29 oct-2 nov)	5	3					6				
Semana 7 (5-9 nov)	5	2			2		6				
Semana 8 (12-16 nov)	5	3		1			6				
Semana 9 (19-23 nov)	5	3		1			6				
Semana 10 (26-30 nov)	6	4					6				
Semana 11 (3-7 dic)	6	3					6				
Semana 12 (10-14 dic)	6	3		1			6				
Semana 13 (17-21 dic)	6	2		2			6				
Semana 14 (7-11 ene)	7	2		2			6				
Semana 15 (14-18 ene)	7	2		2			6				
Semana 16	7			1			6				



(21-25 ene)											
--					2						
Total horas		40		16	4						

EVALUACIÓN (INSTRUMENTOS DE EVALUACIÓN, CRITERIOS DE EVALUACIÓN Y PORCENTAJE SOBRE LA CALIFICACIÓN FINAL, ETC.)

- Exámenes: 80 %
- Seminarios de problemas: 20%.

Se realizarán dos exámenes parciales de la asignatura. Cada examen constará de dos partes (teoría y problemas) que deben aprobarse independientemente.

El primer examen comprenderá los temas 1 a 4. Este examen tiene carácter eliminatorio (si la nota alcanza la puntuación de 5/10) y le corresponderá el 40 % de la nota final.

El segundo comprenderá los temas 5 a 7. Este examen se realizará en la misma fecha que el examen final de Junio y le corresponderá el otro 40 % de la nota final (si la nota alcanza la puntuación de 5/10).

En el caso de no superar el primer parcial, el alumno se examinará de toda la asignatura en el examen final.

En cualquier caso, se requiere una nota final de 5 sobre 10 en el examen escrito para poder considerar las otras actividades de evaluación.

Cualquier alumno podrá decidir no seguir el procedimiento de evaluación continua descrito arriba y, en lugar de ello, presentarse solamente al examen final de la asignatura. Si elige esta opción, deberá comunicarlo dentro de las dos primeras semanas del curso.

En los exámenes podrán utilizarse el formulario general y las tablas de potenciales y constantes universales provistos por el profesor, no admitiéndose ningún otro material, formulario,...

INFORMACIÓN ADICIONAL

