

Fecha de aprobación: 21/06/2023

Guía docente de la asignatura

**Química Física III (2911132)**

<b>Grado</b>	Grado en Química	<b>Rama</b>	Ciencias				
<b>Módulo</b>	Química Física	<b>Materia</b>	Química Física				
<b>Curso</b>	3 <sup>o</sup>	<b>Semestre</b>	1 <sup>o</sup>	<b>Créditos</b>	6	<b>Tipo</b>	Obligatoria

**PRERREQUISITOS Y/O RECOMENDACIONES**

Conocimientos básicos de Matemáticas, (especialmente cálculo diferencial e integral, así como álgebra elemental y estadística elemental) Física y Química. Muy 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 ASOCIADAS A MATERIA/ASIGNATURA****COMPETENCIAS GENERALES**

- CG01 - El alumno deberá adquirir la capacidad de analizar y sintetizar
- CG02 - El alumno deberá adquirir la capacidad de organizar y planificar
- CG03 - El alumno deberá adquirir la capacidad de comunicarse de forma oral y escrita en la lengua oficial del Grado
- CG05 - El alumno deberá adquirir la capacidad de gestionar datos y generar información / conocimiento
- CG08 - El alumno deberá adquirir la capacidad de trabajar en equipo
- CG09 - El alumno deberá adquirir la capacidad de razonar críticamente

**COMPETENCIAS ESPECÍFICAS**

- CE01 - El alumno deberá saber o conocer los aspectos principales de terminología química, nomenclatura, convenios y unidades
- CE03 - El alumno deberá saber o conocer las características de los diferentes estados de la materia y las teorías empleadas para describirlos



- CE04 - El alumno deberá saber o conocer los tipos principales de reacciones químicas y las principales características asociadas a cada una de ellas
- CE06 - El alumno deberá saber o conocer los principios de termodinámica y sus aplicaciones en química
- CE07 - El alumno deberá saber o conocer la cinética del cambio químico, incluyendo catálisis e interpretación mecanicista de las reacciones químicas
- CE11 - El alumno deberá saber o conocer los principios de la mecánica cuántica y su aplicación en la descripción de la estructura y propiedades de átomos y moléculas
- CE13 - El alumno deberá saber o conocer la relación entre propiedades macroscópicas y propiedades de átomos y moléculas individuales: incluyendo macromoléculas, polímeros, coloides y otros materiales
- CE22 - El alumno deberá saber o conocer los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionados con todas las áreas de la Química
- CE25 - El alumno deberá saber hacer o tener la capacidad de evaluar e interpretar datos e información Química
- CE27 - El alumno deberá saber hacer o tener la capacidad de aplicar conocimientos químicos adquiridos a la resolución de problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados
- CE29 - El alumno deberá saber hacer o tener la capacidad de presentar, tanto de forma escrita como oral, material y argumentación científica a una audiencia especializada
- CE30 - El alumno deberá saber hacer o tener la capacidad de utilizar razonadamente las herramientas matemáticas e informáticas para trabajar con datos químicos
- CE46 - El alumno deberá saber o conocer los fundamentos o principios de otras disciplinas necesarios para las distintas áreas de la Química.

## RESULTADOS DE APRENDIZAJE (Objetivos)

Adquirir 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. Capacidad para definir el estado de un sistema químico en función de sus propiedades macroscópica, y analizar la evolución espontánea del mismo. Poseer un conocimiento básico de los fenómenos electroquímicos y sus aplicaciones tecnológicas. Caracterizar la importancia de la Química Física y su impacto en la sociedad industrial y tecnológica.

## PROGRAMA DE CONTENIDOS TEÓRICOS Y PRÁCTICOS

### 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. Reacciones elementales bimoleculares**

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. Electroquímica**

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.

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.

**PRÁCTICO**

Seminarios/Talleres:

Resolución de problemas teóricos y numéricos.

**BIBLIOGRAFÍA****BIBLIOGRAFÍA FUNDAMENTAL**

Atkins. De Paula. Química Física. 8ª Edición. Editorial Médica Panamericana. 2008.



I.N. Levine. Química Física. 5ª Edición. Editorial McGraw Hill. 2004.  
Chang. Físicoquímica. 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.  
I.N. Levine. Problemas de Físicoquímica. 5ª Edición. Editorial McGraw Hill. 2005.

### BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

Castellán. Físicoquímica. 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.  
Labowitz. Físicoquímica, problemas y soluciones. Ed. AC.  
Bares, Grey & Freíd. 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=pdJRHwbndAC](http://books.google.es/books/about/Qu%C3%ADmica_f%C3%ADsica.html?hl=es&id=pdJRHwbndAC). Vista previa de algunos libros de Química Física.

### METODOLOGÍA DOCENTE

- MD01 - Lección magistral/expositiva.
- MD02 - Resolución de problemas y estudios de casos prácticos.
- MD03 - Prácticas de laboratorio.
- MD06 - Seminarios.
- MD08 - Realización de trabajos en grupo.
- MD09 - Realización de trabajos individuales.

### EVALUACIÓN (instrumentos de evaluación, criterios de evaluación y porcentaje sobre la calificación final)

#### EVALUACIÓN ORDINARIA

La evaluación ordinaria consistirá en actividades individuales y en dos pruebas escritas incluyendo cada una ellas tres temas. Las actividades individuales consistirán en la realización de cálculos (numéricos o teóricos) por parte del alumno en dos de las sesiones de seminarios, entregando el alumno la ejecución al profesor para su evaluación. Con respecto a las pruebas



escritas, la primera incluirá los temas 1, 2 y 3 y la segunda incluirá los temas 4, 5 y 6. El alumno recibirá una nota para cada prueba en un rango de 0 a 10 que se obtendrá sumando las notas de los varios ejercicios (cuestiones y problemas) que integren la prueba.

Para aprobar la asignatura, es necesario aprobar las dos pruebas (calificación igual o superior a 5 en ambas pruebas). En ese caso (ambas pruebas aprobadas), la calificación final se calculará como  $0.3 \cdot A + 0.4 \cdot N_1 + 0.3 \cdot N_2$ , donde  $N_1$  y  $N_2$  son las notas de la primera y de la segunda prueba, mientras que  $A$  es la evaluación de las actividades del alumno (en una escala de 0 a 10). De acuerdo con esta ecuación, el porcentaje de las pruebas escritas en la calificación final es del 70%. Nótese que el coeficiente de la nota de la prueba 1 (0.4) es algo superior al de la prueba 2 (0.3), teniendo en cuenta así la mayor extensión de los 3 temas que se incluyen en la prueba 1.

En caso de que una o dos de las pruebas escritas esté suspensa, la calificación final se obtendrá también mediante la ecuación indicada arriba ( $0.3 \cdot A + 0.4 \cdot N_1 + 0.3 \cdot N_2$ ), excepto cuando la nota así calculada sea superior a 4, en cuyo caso la calificación final será de 4.

Las pruebas incluirán tanto cuestiones relacionadas con los aspectos teóricos de la materia, así como problemas, tanto de tipo teórico como numérico. Aun cuando todas las cuestiones tendrán una relación directa con lo explicado en clase en el curso 2023-2024, se introducirán, como norma general, modificaciones razonables. El propósito de este planteamiento es doble. En primer lugar, se pretende facilitar que el alumno aprenda a enfrentarse a situaciones razonablemente nuevas, adquiriendo así una formación de nivel universitario. En segundo lugar, se pretende desincentivar la memorización sin comprensión, un enfoque que usan algunos alumnos y que no contribuye a su formación. En cuestiones que requieran una respuesta expositiva, se valorará, además de la corrección en la respuesta, la capacidad del alumno de transmitir las ideas fundamentales de forma precisa, clara y concisa.

### EVALUACIÓN EXTRAORDINARIA

La evaluación extraordinaria consistirá en dos pruebas escritas incluyendo cada una ellas tres temas. Específicamente, la primera prueba incluirá los temas 1, 2 y 3. La segunda prueba incluirá los temas 4, 5 y 6. El alumno recibirá una nota para cada prueba en un rango de 0 a 10 que se obtendrá sumando las notas de los varios ejercicios (cuestiones y problemas) que integren la prueba.

Para aprobar la asignatura, es necesario aprobar las 2 pruebas (calificación igual o superior a 5 en ambas pruebas). En ese caso (ambas pruebas aprobadas), a la primera prueba le corresponderá un 60% del total de la ponderación de la calificación final de la asignatura, mientras que a la segunda prueba le corresponderá un 40%. Es decir, la calificación final se calculará como  $0.6 \cdot N_1 + 0.4 \cdot N_2$ , donde  $N_1$  y  $N_2$  son las notas de la primera y de la segunda prueba. Esta forma de ponderar las dos pruebas tiene en cuenta el hecho de que los tres primeros temas de la asignatura son más extensos y de carácter más fundamental que los tres últimos temas.

En caso de que una o dos de los pruebas esté suspensa, la calificación final será la media ponderada de las calificaciones de las dos pruebas, calculada como se indica arriba (es decir,  $0.6 \cdot N_1 + 0.4 \cdot N_2$ ), excepto cuando dicha media sea superior a 4, en cuyo caso la calificación final será de 4.

Cada prueba constará de varios ejercicios, incluyendo cuestiones relacionadas con los aspectos teóricos de la materia, así como problemas, tanto de tipo teórico como numérico. Aun cuando todas las cuestiones y problemas tendrán una relación directa con lo explicado en clase en el curso 2023-2024, se introducirán, como norma general, modificaciones razonables. El propósito de este planteamiento es doble. En primer lugar, se pretende facilitar que el alumno aprenda a enfrentarse a situaciones razonablemente nuevas, adquiriendo así una formación de nivel universitario. En segundo lugar, se pretende desincentivar la memorización sin comprensión, un enfoque que usan algunos alumnos y que no contribuye a su formación. En cuestiones que requieran una respuesta expositiva, se valorará, además de la corrección en la respuesta, la capacidad del alumno de transmitir las ideas fundamentales de forma precisa, clara y concisa.



## EVALUACIÓN ÚNICA FINAL

En virtud al Artículo 8 de la Normativa de Evaluación y Calificación de los Estudiantes de la Universidad de Granada, el alumno puede examinarse mediante la evaluación única final. Para acogerse a la opción de evaluación única final, el estudiante ha de solicitarlo al Director del Departamento en las dos primeras semanas de impartición de la asignatura o en las dos semanas siguientes a su matriculación si ésta se ha producido con posterioridad al inicio de la asignatura, alegando y acreditando las razones que le asisten para no poder seguir el sistema de evaluación continua.

La evaluación única final consistirá en dos pruebas escritas incluyendo cada una ellas tres temas. Específicamente, la primera prueba incluirá los temas 1, 2 y 3. La segunda prueba incluirá los temas 4, 5 y 6. El alumno recibirá una nota para cada prueba en un rango de 0 a 10 que se obtendrá sumando las notas de los varios ejercicios (cuestiones y problemas) que integren la prueba.

Para aprobar la asignatura, es necesario aprobar las 2 pruebas (calificación igual o superior a 5 en ambas pruebas). En ese caso (ambas pruebas aprobadas), a la primera prueba le corresponderá un 60% del total de la ponderación de la calificación final de la asignatura, mientras que a la segunda prueba le corresponderá un 40%. Es decir, la calificación final se calculará como  $0.6 \times N_1 + 0.4 \times N_2$ , donde  $N_1$  y  $N_2$  son las notas de la primera y de la segunda prueba. Esta forma de ponderar las dos pruebas tiene en cuenta el hecho de que los tres primeros temas de la asignatura son más extensos y de carácter más fundamental que los tres últimos temas.

En caso de que una o dos de los pruebas esté suspensa, la calificación final será la media ponderada de las calificaciones de las dos pruebas, calculada como se indica arriba (es decir,  $0.6 \times N_1 + 0.4 \times N_2$ ), excepto cuando dicha media sea superior a 4, en cuyo caso la calificación final será de 4.

Cada prueba constará de varios ejercicios, incluyendo cuestiones relacionadas con los aspectos teóricos de la materia, así como problemas, tanto de tipo teórico como numérico. Aun cuando todas las cuestiones y problemas tendrán una relación directa con lo explicado en clase en el curso 2023-2024, se introducirán, como norma general, modificaciones razonables. El propósito de este planteamiento es doble. En primer lugar, se pretende facilitar que el alumno aprenda a enfrentarse a situaciones razonablemente nuevas, adquiriendo así una formación de nivel universitario. En segundo lugar, se pretende desincentivar la memorización sin comprensión, un enfoque que usan algunos alumnos y que no contribuye a su formación. En cuestiones que requieran una respuesta expositiva, se valorará, además de la corrección en la respuesta, la capacidad del alumno de transmitir las ideas fundamentales de forma precisa, clara y concisa.

