

GUÍA ACADÉMICA

Química Física Avanzada

Isidro Salvador Monzó

Enrique Ortí

Clara Gómez

Juan Luis Pascual-Ahuir

Ignacio Tuñón

Departamento de Química Física

Universitat de València

I.- DATOS INICIALES DE IDENTIFICACIÓN

Nombre de la asignatura:	Química Física Avanzada
Carácter:	Troncal
Titulación:	Ciencias Químicas
Ciclo:	Segundo Ciclo
Departamento:	Química Física

II.- INTRODUCCIÓN A LA ASIGNATURA

La asignatura *Química Física Avanzada* es una asignatura troncal de carácter anual. En el plan de estudios actualmente en vigor consta de un total de 9.0 créditos ECTS.

Con esta asignatura se pretende, esencialmente, que el alumno complete su formación químico física. En las asignaturas de *Fundamentos de Química Física* y *Química Física* el alumno ha adquirido conocimientos de las visiones macroscópicas (fundamentalmente Termodinámica) y microscópicas (Cuántica) de la materia. En esta asignatura se pretende iniciar en el carácter complementario de ambas visiones, mostrando como la Termodinámica Estadística permite el cálculo de las propiedades macroscópicas de la materia a partir de las propiedades microscópicas de sus constituyentes. Además de este propósito fundamental, se pretende formar al alumno en otros conocimientos químico físicos todavía no adquiridos, tales como los fenómenos de superficies y los polímeros.

III.- VOLUMEN DE TRABAJO

Para el cálculo del mismo se ha tomado como referencia un total de 30 semanas lectivas por curso. La distribución prevista del trabajo es la siguiente:

Asistencia a clases: 56 horas/curso.

Estudio-preparación clases: 3.5 h/sem x 30 sem = 105 horas/curso.

Estudio para exámenes: 18 h/examen x 2 exámenes = 36 h/curso

Realización de exámenes: 4 horas/examen x 2 exámenes = 8 horas/curso.

Asistencia a tutorías: 1 hora/3 semanas x 30 semanas = 10 horas/curso.

Trabajo en el aula informática: 2 horas/sesión x 2 sesiones = 4 horas/curso.

Asistencia a seminarios: 2 horas/curso.

Preparación de trabajos: 2 trabajos = 10 horas/curso.

En síntesis:

ACTIVIDAD	Horas/curso
ASISTENCIA A CLASES	56
ESTUDIO PREPARACIÓN CLASES	105
ESTUDIO PREPARACIÓN DE EXÁMENES	36
REALIZACIÓN DE EXÁMENES	8
ASISTENCIA A TUTORÍAS	10
AULA INFORMATICA	4
ASISTENCIA A SEMINARIOS	2
PREPARACION TRABAJOS	10
TOTAL VOLUMEN DE TRABAJO	231

El volumen de trabajo resultante resulta ser de 25.7 horas/crédito.

IV.- CONTENIDOS

La asignatura se estructura en cuatro grandes bloques de conocimiento físico-químico:

- Termodinámica Estadística
- Fenómenos de Transporte y Cinética Molecular
- Fenómenos de Superficie
- Introducción a los Polímeros

Los contenidos concretos se resumen en:

- Principios básicos termodinámicos de la mecánica estadística
- Aplicación para el estudio de las propiedades termodinámicas de los sistemas ideales y reales.
- Comprensión microscópica de los fenómenos de no equilibrio: procesos de transporte y cinética molecular
- Introducción y manejo de distintas teorías microscópicas para explicar la reactividad química: teoría de colisiones y teoría del complejo activado.
- Introducción y manejo del concepto de superficie de energía potencial

- Estudio termodinámico de las interfases. Conceptos de tensión superficial y adsorción. Isotermas de Gibbs, Langmuir y BET
- Análisis mecanístico de la catálisis heterogénea: etapas y ejemplo de interés
- Estudio de las interfases electrizadas. Aplicación a los coloides
- Introducción a la ciencia de los polímeros. Conceptos básicos y termodinámica de sus disoluciones.

V.- DESTREZAS A ADQUIRIR

- Cálculo de las funciones de partición moleculares y, a partir de ellas, de las propiedades termodinámicas de la materia en particular la energía libre y las constantes de equilibrio.
- Cálculo de propiedades termodinámicas de sistemas reales, tales como los coeficientes del virial en gases.
- Análisis estructural de líquidos a partir de sus funciones de distribución radial.
- Manejo de las funciones de distribución de velocidades con el objetivo de conocer las proporciones de moléculas que presentan unos determinados valores de la velocidad. Obtención de propiedades de transporte a partir de las velocidades medias.
- Cálculo de las constantes de velocidad de reacciones bimoleculares a partir de la teoría de colisiones y de la teoría del estado de transición.
- Uso de las isothermas para cuantificar la adsorción superficial de una sustancia tanto sobre líquidos (Gibbs) como sobre sólidos (Langmuir y BET).
- Racionalizar el comportamiento de las reacciones con catálisis heterogénea en función de las distintas etapas que la forman. Deducir el mecanismo que rige una determinada reacción a partir de observaciones experimentales
- Adquirir conceptos básicos sobre los polímeros y en particular sus disoluciones.
- Ser capaces de entender las ecuaciones matemáticas que gobiernan los fenómenos bajo estudio, así como manejarlas haciendo uso de los distintos sistemas de unidades.

VI.- HABILIDADES SOCIALES

Durante el curso se fomentará el desarrollo de diversas competencias genéricas, entre las cuales destacamos:

- Habilidad para argumentar desde criterios racionales.
- Capacidad de análisis y de síntesis en el estudio de problemas químico físicos.
- Capacidad para obtener la información adecuada con la que poder afrontar nuevos problemas químicos que se le planteen.

VII.- TEMARIO Y PLANIFICACIÓN TEMPORAL

Bloque I. Termodinámica Estadística

Tema 1. Termodinámica Estadística: Fundamentos y Sistemas de Partículas

Independientes.

(10 horas)

- Introducción a la Termodinámica Estadística
- Estados de un Sistema. Relación entre las Propiedades Macroscópicas y Microscópicas de un Sistema.
- Funciones Termodinámicas en el Colectivo Canónico.
- Propiedades e interpretación de la Función de Partición Canónica.
- Función de Partición en Sistemas de Partículas no Interactuantes.
- Función de Partición Molecular.
- Propiedades Termodinámicas del Gas Ideal.

Tema 2. Termodinámica Estadística de Sistemas Reales

(9 horas)

- Introducción. Fuerzas Intermoleculares
- Función de Partición Clásica
- Gases Reales
- Capacidad calorífica en Sólidos Cristalinos

- Líquidos. Función de distribución Radial

Tema 3. Teoría Cinética de Gases (5 horas)

- Introducción a la Teoría Cinética de Gases
- Función de Distribución de la Velocidad
- Velocidades Medias y más Probable
- Función de Distribución de la Energía
- Colisiones con las Paredes. Efusión
- Colisiones Intermoleculares

Bloque II. Fenómenos de Transporte y Cinética Molecular

Tema 4. Fenómenos de Transporte (4 horas)

- Introducción a los Fenómenos de Transporte: Conductividad térmica, Viscosidad y Difusión
- Conductividad Térmica: ley de Fourier.
- Viscosidad: leyes de Newton y Poiseuille
- Difusión: Primera ley de Fick
- Tratamiento microscópico de los fenómenos de transporte en gases ideales
- Difusión en líquidos.

Tema 5. Cinética Molecular (7 horas)

- Introducción
- Teoría de Colisiones
- Superficies de Energía Potencial y Dinámicas de Reacción
- Teoría del Estado de Transición
 - Desarrollo de la TET
 - Formulación Termodinámica

- Efectos Cinéticos Isotópicos
- Limitaciones de la TET

Bloque III. Fenómenos de Superficie

Tema 6. Estudio Termodinámico de la Interfase (6 horas)

- Región interfacial o interfase
- Tensión superficial
- Interfases curvas

Ecuación de Young-Laplace

Presión de vapor en superficies curvas: ecuación de Kelvin

Capilaridad

- Termodinámica de superficies en sistemas multicomponente: Isoterma de adsorción de Gibbs.
- Monocapas

Tema 7. Superficies Sólidas: Adsorción y Catálisis (8 horas)

- Estructura y composición de superficies sólidas
- Adsorción de gases sobre sólidos
- Isotermas de adsorción
- Velocidad de los procesos superficiales
- Características de los fenómenos catalíticos
- Mecanismos de catálisis y energía de activación
- Características de la catálisis heterogénea
- Etapas de la catálisis heterogénea
- Mecanismos de catálisis heterogénea
- Ejemplos de catálisis heterogénea

Tema 8. Interfases Electrizadas (4 horas)

- Introducción

- Termodinámica de la Interfase Electrizada
- Estructura de la Interfase
Modelo de Helmholtz-Perrin o de la doble capa rígida
Modelo de Gouy-Chapman o de la doble capa difusa
Modelo de Stern
- Doble Capa y Coloides

Bloque IV. Introducción a los Polímeros

Tema 9. Química Física de los Polímeros (3 horas)

- Definiciones generales
- Clasificación y tipos de polímeros
- Distribución de pesos moleculares
- Configuración y conformación
- Termodinámica de polímeros en disolución

X.- CONOCIMIENTOS PREVIOS

A fin de poder abordar con éxito la asignatura, es imprescindible que el estudiante posea una serie de conocimientos previos. Dichos conocimientos comprenden:

- Manejo de conceptos termodinámicos (energía interna, entropía y energía libre, espontaneidad y equilibrio) y de cinética básica (mecanismo, etapa lenta, orden de reacción, ecuaciones integradas).
- Manejo de conceptos cuánticos, tales como función de onda, estados y niveles. Conocimiento de las soluciones de sistemas modelo (partícula en la caja, rotor rígido, ...)

- Cálculo básico de derivadas e integrales.
- Manejo de los diferentes sistemas de unidades

VIII.- METODOLOGÍA

El desarrollo de la asignatura se estructura en torno a dos ejes principales: las sesiones de teoría y problemas y las tutorías.

En las clases de teoría se explicarán los conceptos fundamentales para cada uno de los temas recogidos en el temario, indicando las fuentes bibliográficas necesarias para la profundización del alumno. Además los alumnos dispondrán de apuntes realizados por el profesor (disponibles en la página web) que pueden servir como *punto de partida* para el trabajo del alumno, *nunca como material único* de estudio. Tras exponer los conceptos teóricos se realizarán problemas correspondientes al tema.

Por lo que respecta a las sesiones de tutoría se trabajarán dos aspectos además de las dudas presentadas por los alumnos: deducciones de expresiones que no se hayan abordado en las clases teóricas, así como cuestiones y problemas adicionales.

Además, está prevista la realización de dos sesiones en el aula informática en la que se manejarán programas informáticos con los que se analizarán distintos aspectos vistos en la asignatura, tales como la simulación de distintos estados de la materia y de reacciones elementales.