



Grado en Química **27207 - Química física I**

Guía docente para el curso 2011 - 2012

Curso: 2, Semestre: 0, Créditos: 10.0

Información básica

Profesores

- **Ignacio Gascón Sabaté** igascon@unizar.es
- **Pascual Pérez Pérez** pascual@unizar.es
- **María Inmaculada Velasco Albillos** curra@unizar.es
- **Manuela Artal Lerín** martal@unizar.es
- **María Asunción Gallardo Jiménez** qoqf@unizar.es
- **María del Carmen López Montanya** mcarmen@unizar.es

Recomendaciones para cursar esta asignatura

Se recomienda:

- Tener aprobadas al menos las asignaturas de 1er curso de Química: Química General, Introducción al Laboratorio Químico, Física y Matemáticas.
- Estar matriculado en la asignatura: Laboratorio de Química de 2º curso.
- Realizar un trabajo regular y continuado a lo largo del curso, participando activamente en las clases y tutorías, y resolviendo los problemas y casos propuestos.
- Acostumbrarse a consultar libros específicos relacionados con la asignatura.

Actividades y fechas clave de la asignatura

El calendario correspondiente al curso así como las fechas y horarios de clases y exámenes de la asignatura se pueden consultar en la siguiente página de internet:

<http://ciencias.unizar.es/web/horarios.do>

Las fechas correspondientes a los controles y seminarios se indicarán a lo largo del curso.

Requisitos

Requisitos para cursar esta asignatura

Es necesario haber superado al menos 27 créditos del Módulo Básico y haber cursado las asignaturas de Química General e Introducción al Laboratorio Químico de primer curso.

Inicio

Resultados de aprendizaje que definen la asignatura

El estudiante, para superar esta asignatura, deberá demostrar los siguientes resultados...

- 1:**
Efectúa análisis, síntesis, razonamiento crítico y de aprendizaje autónomo.
- 2:**
Ha adquirido espíritu emprendedor y capacidad para aprendizaje autónomo y para el trabajo en grupo, y resolución de problemas.
- 3:**
Distingue entre enfoque macroscópico y microscópico.
- 4:**
Conoce el significado, maneja con soltura y relaciona las magnitudes quimicofísicas incluidas en el programa de la asignatura.
- 5:**
Sabe utilizar estas propiedades quimicofísicas en diferentes tipos de cálculos y razonamientos.

Introducción

Breve presentación de la asignatura

Asignatura Obligatoria del módulo Fundamental con 10 ECTS de los que 6 corresponden a conocimientos teóricos y 4 a problemas y seminarios. Tiene como función principal proporcionar a los alumnos una formación básica y general en campos fundamentales de la Química Física como la Termodinámica, la Electroquímica y la Cinética Química. Los conocimientos adquiridos serán de gran importancia para comprender las bases de muchos procesos químicos que serán presentados en otras asignaturas de Química del Grado.

Contexto y competencias

Sentido, contexto, relevancia y objetivos generales de la asignatura

La asignatura y sus resultados previstos responden a los siguientes planteamientos y objetivos:

1. Conocer los conceptos y principios esenciales de la Química Física y aplicarlos al estudio de sistemas de interés en Química.
2. Aplicar los conocimientos teóricos a la resolución de cuestiones y problemas, utilizando adecuadamente los sistemas de unidades y analizando e interpretando físicamente los resultados obtenidos.
3. Expresar los conceptos con la precisión requerida en el ámbito científico y ser capaz de establecer relaciones entre los distintos conceptos.
4. Poseer bases sólidas para poder continuar con éxito el aprendizaje en asignaturas posteriores y en aspectos más avanzados de la Química Física.
5. Obtener bases sólidas para poder continuar con éxito el aprendizaje en asignaturas posteriores y en aspectos más

avanzados de la Química Física.

6. Proporcionar una sólida base (conocimientos y habilidades) que le capacite para continuar los estudios en áreas especializadas, o en el ejercicio de su profesión.

Contexto y sentido de la asignatura en la titulación

La asignatura se ubica en el Módulo Fundamental ya que trata de contenidos fundamentales de Termodinámica, Electroquímica y Cinética Química que serán de gran importancia en el desarrollo de otras asignaturas de Química del Grado y en particular del resto de asignaturas de Química Física.

Al superar la asignatura, el estudiante será más competente para...

- 1:** Reconocer la importancia de la Química Física en el contexto de la Química y la Ciencia en general y su impacto social.
- 2:** Utilizar tablas y gráficos de datos quimicofísicos y las leyes o ecuaciones de la Química con sentido crítico, considerando su aplicabilidad y adecuación a los problemas químicos concretos.
- 3:** Ejercer crítica y autocrítica sobre la forma de obtención (métodos, fuentes...) de resultados, ya sea mediante cálculos o mediante medidas experimentales.
- 4:** Conocer y comprender los conceptos fundamentales de la Termodinámica y su aplicación dentro del campo de la Química.
- 5:** Ser capaz de proponer experimentos para determinar los valores de propiedades termodinámicas y sus variaciones en reacciones químicas y procesos de cambio de fase.
- 6:** Saber elegir los sistemas de referencia adecuados para los sistemas reales y calcular las magnitudes que miden su desviación respecto de la idealidad.
- 7:** Analizar y construir diagramas de fases y emplear dichos diagramas para la realización de procesos químicos de interés práctico como separaciones o extracciones.
- 8:** Determinar la posición de equilibrio de reacciones químicas para unas condiciones experimentales dadas y manipular esas condiciones experimentales para alcanzar posiciones de equilibrio prefijadas.
- 9:** Conocer y manejar con rigor los conceptos fundamentales de disoluciones electrolíticas y de sistemas electroquímicos.
- 10:** Distinguir los diferentes tipos de electrodos y pilas galvánicas así como sus principales aplicaciones.
- 11:** Conocer los factores de los que depende velocidad de una reacción química, su determinación experimental y expresión de la misma en términos de una ecuación cinética.
- 12:** Entender e interpretar el comportamiento cinético de las reacciones químicas en términos de secuencias de reacciones elementales (mecanismos).
- 13:** Comprender y analizar experimentos cinéticos utilizando diversas técnicas quimicofísicas y ser capaz de interpretar los resultados.
- 14:** Ser capaz de manejar aplicaciones informáticas básicas para tratamientos de datos.

Importancia de los resultados de aprendizaje que se obtienen en la asignatura:

Mediante ellos el alumno:

1. Comprenderá y manejará la terminología básica propia de la Termodinámica, la Electroquímica y la Cinética Química.
2. Será capaz de explicar de manera comprensible los aspectos energéticos y cinéticos de procesos básicos de la Química.
3. Será capaz de explicar de manera comprensible los fenómenos y procesos relacionados con aspectos básicos de la Electroquímica.
4. Poseerá una visión suficientemente amplia y profunda de la Termodinámica, la Electroquímica y la Cinética Química que le permitirá con posterioridad adquirir conocimientos específicos en cada una de esas partes de la Química Física.

Evaluación

Actividades de evaluación

El estudiante deberá demostrar que ha alcanzado los resultados de aprendizaje previstos mediante las siguientes actividades de evaluación

1:

La evaluación constará de *exámenes escritos* en los que el alumno tendrá que responder razonadamente a cuestiones teórico-prácticas, pudiendo incluir cálculos numéricos. La nota de estos exámenes contribuirá con un mínimo de un 80% a la nota total. Además, a lo largo del curso se podrán hacer controles y ejercicios de la materia (calificación **C**) que contribuirán con un máximo de un 20% a la nota global de la asignatura.

Esta asignatura se podrá aprobar por exámenes parciales (primer parcial o bloque **B1**: Termodinámica Química; segundo parcial o bloque **B2**: Electrolitos-Electroquímica y Cinética) o por un examen de toda la asignatura.

En todo caso para obtener la nota de los dos tipos de *exámenes escritos* se multiplicará por 0,4 la nota de la materia de Termodinámica Química, y por 0,6 la nota de la materia de Electrolitos-Electroquímica-Cinética. Además, se exigirá aprobar independientemente las dos materias mencionadas, aunque se puede compensar entre ellas con una calificación individual mínima de 4,5.

2:

El calendario de los *exámenes escritos* será el siguiente:

* En el periodo de enero-febrero (calendario establecido por la Facultad) se realizará un examen **eliminadorio** de materia correspondiente al 1^{er} Parcial (calificación **B1**).

* En el periodo oficial de exámenes de la Convocatoria de junio (establecido por la Facultad) se realizará una prueba en la que el alumno optará por UNA de las siguientes opciones:

- Examen de toda la asignatura (calificación **F**)
- 2º parcial (calificación **B2**)

A los alumnos que hayan aprobado sólo uno de los exámenes parciales se les guardará la calificación correspondiente hasta la convocatoria de septiembre.

* En el periodo oficial de exámenes de la Convocatoria de septiembre (establecido por la Facultad) se realizará una prueba en la que el alumno optará por UNA de las siguientes opciones:

- Examen de toda la asignatura (**F**)
- Aquellos alumnos que ya hayan superado previamente un parcial (*primer parcial en febrero o segundo parcial en junio*), si lo desean podrán presentarse únicamente al parcial no superado: 1^{er} parcial (**B1**) o 2º parcial (**B2**)

3:

Obtención de la *nota final de la asignatura*:

La calificación será la mejor de las obtenidas al aplicar estas fórmulas (en función de si se presentan por bloques o al examen de toda la asignatura):

$$1: [0,8 (0,4 \cdot B1 + 0,6 \cdot B2) + 0,2 \cdot C] \text{ ó } [0,4 \cdot B1 + 0,6 \cdot B2]$$

$$2: [0,8 F + 0,2 \cdot C] \text{ ó } F.$$

- 4:** El número de convocatorias oficiales de examen a las que la matrícula da derecho (2 por matrícula) así como el consumo de dichas convocatorias se ajustará a la Normativa de Permanencia en Estudios de Grado (http://www.unizar.es/sg/doc/BOUZ10-10_001.pdf) y Reglamento de Normas de Evaluación del Aprendizaje. A este último reglamento, también se ajustará el sistema de calificación, y de acuerdo a la misma se hará público el horario, lugar y fecha en que se celebrará la revisión al publicar las calificaciones. Dicha normativa puede consultarse en:

<http://wzar.unizar.es/servicios/coord/norma/evalu/evalu.html>

Actividades y recursos

Presentación metodológica general

El proceso de aprendizaje que se ha diseñado para esta asignatura se basa en lo siguiente:

En todo caso, el proceso de aprendizaje constará de:

1. Actividad formativa 1: Adquisición de conocimientos teóricos de Química Física (6 ECTS) en clases magistrales participativas en grupo grande.
2. Actividad Formativa 2: Clases de resolución de problemas y seminarios (4 ECTS) donde los alumnos bajo la supervisión del profesor trabajarán en grupos pequeños, participando activamente en estas actividades

Actividades de aprendizaje programadas (Se incluye programa)

El programa que se ofrece al estudiante para ayudarle a lograr los resultados previstos comprende las siguientes actividades...

- 1:** **Termodinámica: 42 horas (22 de teoría y 20 de problemas/seminarios)**

Introducción y conceptos fundamentales, en este apartado se incluyen algunas nociones matemáticas aplicables a las funciones de estado. Gases reales. Termometría.

Principios de termodinámica: Primer Principio. Cálculo de magnitudes termodinámicas incluidas en la primera ley para gases ideales, variación de la entalpía de reacción con la temperatura, y reacciones en condiciones adiabáticas. Segundo principio: Cálculos de variación de entropía en sistemas cerrados, que incluyen procesos cíclicos, isotérmicos, isobáricos, isocóricos, adiabáticos, reversibles o irreversibles aplicados a un gas ideal. Procesos de mezcla de gases ideales. Entropía como criterio de espontaneidad y equilibrio. Significado de entropía. Experimentos de Joule y Joule Thompson. Tercer Principio de termodinámica

Funciones Gibbs y Helmholtz, su validez como criterios de espontaneidad y equilibrio. Relaciones termodinámicas para un sistema cerrado en equilibrio. Relaciones de Maxwell, relaciones de Gibbs-Helmholtz. Dependencia de las funciones termodinámicas de las variables p, V y T. Cálculo de las variaciones de las funciones U, H, S, A y G en cualquier proceso.

Sistemas multicomponentes: Magnitudes Molares Parciales. Potencial químico. Ecuación de Gibbs-Duhem. Condición general de equilibrio material en sistemas cerrados, equilibrio de fase y equilibrio químico. Equilibrio de fases en sustancias puras: Regla de las fases. Diagramas de fases. Ecuación de Clapeyron. Potenciales químicos de las sustancias puras. Comportamiento de gases reales. Mezclas de gases reales

Disoluciones: Disoluciones ideales: definición y potenciales químicos de los componentes, presión de vapor, ley de Raoult. Disoluciones diluidas ideales: definición y potenciales químicos de los componentes. Ley de Henry, solubilidad de gases en líquidos. Propiedades coligativas. Disminución de la presión de vapor. Ascenso ebullioscópico. Descenso crioscópico. Presión osmótica. Propiedades coligativas en disoluciones de electrolitos. Coeficiente de reparto. Disoluciones no ideales: Definición y potenciales químicos de los componentes, actividad, presión de vapor, determinación de los coeficientes de actividad. Coeficientes de actividad en la escala de molaridades y molalidades. Disoluciones de electrolitos. Definición y propiedades que las caracterizan. Termodinámica de estas disoluciones. Elección de los estados normales, convenios, coeficiente de actividad iónico medio. Equilibrios de fases en sistemas multicomponentes. Equilibrio líquido-vapor en disoluciones ideales y no ideales a temperatura constante y a presión constante. Regla de la palanca. Azeótropos. Destilación simple y destilación fraccionada. Sistemas parcialmente miscibles. Sistemas inmiscibles.

Equilibrio químico: La constante de equilibrio. Equilibrio químico en sistemas de gases ideales, en sistemas de gases reales, en disoluciones no electrolíticas y en disoluciones electrolíticas. Dependencia de la constante de equilibrio de la temperatura y la presión. Desplazamiento del equilibrio químico: variación de la temperatura a presión constante en un sistema cerrado, variación de la presión a temperatura constante en un sistema cerrado, variaciones en la cantidad de las sustancias presentes en el sistema.

2: Electrolitos y electroquímica: 18 horas (8 de teoría y 10 de problemas/seminarios)

Electrolitos: Presentación descriptiva de la ley límite de Debye Hückel. Variación del coeficiente de actividad de los electrolitos con la concentración. Conducción de la corriente eléctrica, ley de Ohm en metales y en disoluciones iónicas. Medidas de conductividad en disoluciones electrolíticas. Ley de Kohlrausch de la migración independiente de iones. Conductividad molar. Influencia de la concentración en la conductividad molar de los electrolitos. Efecto de asimetría. Efecto electroforético. Números de transporte. Determinación de los números de transporte mediante los métodos de Hittorf y de la interfase móvil.

Electroquímica: Sistema electroquímico. Termodinámica de estos sistemas, potencial electroquímico. Pilas galvánicas. Fuerza electromotriz. Pila Daniell. Medida de la fuerza electromotriz de una pila. Tipos de electrodos reversibles. Termodinámica de pilas galvánicas, ecuación de Nernst. Potencial de unión líquido-líquido. Potenciales normales de electrodo. Aplicaciones de las medidas de la f.e.m. a la determinación de propiedades termodinámicas, constantes de equilibrio, coeficientes de actividad, pH, valoraciones potenciométricas. Pilas de concentración con y sin transporte. Baterías. Pilas de combustible.

3: Cinética: 40 horas (30 de teoría y 10 de problemas/seminarios)

Cinética de reacción: Introducción y definiciones. Medidas de velocidades de reacción, métodos químicos, físicos, de relajación, para reacciones rápidas, etc. Ecuaciones integradas: irreversibles de distintos órdenes, reversibles, consecutivas, paralelas. Métodos para determinar las ecuaciones cinéticas. Mecanismos de reacción. Aproximación de la etapa limitante y aproximación del estado estacionario. Proposición de mecanismos de reacción. Relación entre la constante termodinámica y constantes cinéticas en las reacciones complejas. Influencia de la temperatura en la velocidad de reacción: ecuación de Arrhenius, energía de activación. Reacciones unimoleculares, mecanismo de Lindemann. Reacciones trimoleculares, reacciones en cadena. Obtención de HBr y HCl a partir de hidrógeno y los correspondientes halógenos. Descomposiciones orgánicas, mecanismo de Rice-Herzfeld. Reacciones en cadena ramificada. Catálisis homogénea en fase gas, disminución de la capa de ozono en la estratosfera. Catálisis homogénea en fase líquida: catálisis ácido-base.

Planificación y calendario

Calendario de sesiones presenciales y presentación de trabajos

El calendario de la asignatura en cuanto a clases presenciales se podrá consultar en:
<http://ciencias.unizar.es/web/horarios.do>

El calendario de la asignatura en cuanto a los seminarios se distribuirá a lo largo del curso.

Bibliografía

La bibliografía recomendada es la siguiente:

- 1: Atkins, P. y de Paula, J. "Química Física". 8ª edición. Editorial. Panamericana 2008.
- 2: Bertrán Rusca, J. y Núñez Delgado, J. (coordinadores) "Química Física". Ariel 2002
- 3: Díaz Peña, M. y Roig Muntaner, A. "Química Física". Editorial Alhambra 1989
- 4: Engel, T y Reid, P. "Química Física". Pearson Education S.A., Addison Wesley 2006
- 5: Levine, I. N. "Fisicoquímica". 5ª Edición. McGraw-Hill / Interamericana de España 2004
- 6: Criado-Sancho, M.; Jover, S.; Peral, F.; de la Plaza, A. y Senent, S. "Termodinámica Química". UNED 1984
- 7: Glasstone "Termodinámica para Químicos". Editorial Aguilar. 1978
- 8: Rock, P. A. "Termodinámica Química", Vicens-Vives. 1989
- 9: Rodríguez, J. A.; Ruiz, J. J.; y Urieta, J. S.; "Termodinámica Química". Editorial Síntesis, 2ª edición. 2000
- 10: Logan, S. R. "Fundamentos de Cinética Química". Addison Wesley 2000
- 11: Senent, S. "Química Física II: Cinética Química". 2ª Edición. UNED 1989 (última impresión del 2000)
- 12: *Libros exclusivamente de problemas o cuestiones*
 - Labowitz, L. C y Arents, J. S. "Fisico Química. Problemas y soluciones". Editorial AC. 1974. (en otros sitios aparece primera edición en 1986)
 - Ruiz Sánchez, J. J. "Cuestiones de Termodinámica Química". Servicio de Publicaciones de la Universidad de Córdoba.
- 13: *Bases de datos*
 - NIST Chemistry WebBook (libro de la Web de Química del NIST): <http://webbook.nist.gov/chemistry/>
 - Constantes físicas fundamentales: <http://physics.nist.gov/cuu/Constants/>
 - Sistema Internacional (SI) de Unidades: <http://physics.nist.gov/cuu/Units/index.html>

14:

Referencias bibliográficas de la bibliografía recomendada

- Atkins, Peter William. Química física / Peter Atkins, Julio de Paula . - 8ª ed. Buenos Aires [etc.] : Editorial Médica Panamericana, cop. 2008
- Díaz Peña, Mateo. Química física / M. Díaz Peña, A. Roig Muntaner . - 1a. ed., 6a. reimp Madrid : Alhambra, 1985-1986
- Engel, Thomas. Química física / Thomas Engel, Philip Reid ; capítulo 27, Química computacional, contribución de Warren Hehre ; traducción y revisión técnica, Alberto Requena Rodríguez, José Zúñiga Román, Adolfo Bastida Pascual Madrid [etc.] : Pearson Addison Wesley, D.L. 2006
- Glasstone, Samuel. Termodinámica para químicos / Samuel Glasstone ; versión española de Juan Sancho Gómez . - 5a ed., 5a reimp. Madrid : Aguilar, 1978
- Labowitz, Leonard C.. Fisicoquímica : problemas y soluciones / Leonard C. Labowitz, John S. Arents ; [traducción de Manuel Sánchez Pérez] . - [1a. ed. castellana] Madrid : AC, D.L. 1978
- Levine, Ira N.. Fisicoquímica / Ira N. Levine ; traducción, Angel González Ureña ; con la colaboración de Antonio Rey Gayo ... [et al.] . - 5ª ed. Madrid [etc.] : McGraw-Hill, cop. 2004
- Logan, Sam R.. Fundamentos de cinética química / S. R. Logan, traducción Concepción Pardo García-Pumarino ; revisión

- técnica J. A. Rodríguez Renuncio . - 1a ed. en español Madrid : Addison Wesley Iberoamericana, cop. 2000
- McQuarrie, Donald A.. Physical chemistry : a molecular approach / Donald A. McQuarrie, John D. Simon Sausalito, California : University Science Books, cop. 1997
 - Química física / Joan Bertrán Rusca y Javier Núñez Delgado (coords.) Barcelona : Ariel, cop. 2002
 - Rock, Peter Alfred. Termodinámica química / Peter A. Rock ; traducción de Javier Nuñez Delgado...[et al.] . - [1a ed.] Barcelona : Vicens-Vives, 1989
 - Rodríguez Renuncio, Juan Antonio. Termodinámica química / Juan Antonio Rodríguez Renuncio, Juan José Ruiz Sánchez, José Santiago Urieta Navarro . - [2a ed.] Madrid : Síntesis, 2000
 - Ruiz Sánchez, Juan José. Cuestiones de Termodinámica química / Juan José Ruiz Sánchez . - 2a ed. Córdoba : Universidad, Servicio de Publicaciones, D.L.1999
 - Senent Pérez, Salvador. Química física II / Salvador Senent . - 2a. ed., 1a. reimp. Madrid : Universidad Nacional de Educación a Distancia, 1992
 - Termodinámica química / redactada en el Departamento de Química Física de la UNED bajo la dirección de Salvador Senent Pérez ; equipo de redacción Manuel Criado Sancho... [et al.] . - [1a. ed.] Madrid : UNED, 1984-1985