



## Máster en Investigación Química 60618 - Química Física avanzada

Guía docente para el curso 2015 - 2016

Curso: , Semestre: , Créditos: 6.0

---

### Información básica

---

#### Profesores

No están disponibles estos datos.

#### Recomendaciones para cursar esta asignatura

- Dominar los conceptos fundamentales del Equilibrio de Fases y de Electroquímica
- Trabajar desde el primer día de forma continuada la resolución de problemas y casos prácticos.
- Dominar el inglés científico para un uso ágil de materiales y documentos de consulta.
- Tener conocimientos elementales del manejo de las herramientas TIC's para el desarrollo de las actividades programadas en el Anillo Digital Docente.

#### Actividades y fechas clave de la asignatura

El calendario y horarios correspondientes al curso así como las fechas e hitos clave de la asignatura se pueden consultar en la página de web de la Facultad de Ciencias.

Fecha límite de entrega de trabajos y problemas: última semana del periodo de clases del primer semestre.

---

### Inicio

---

### Resultados de aprendizaje que definen la asignatura

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

- 1:** Resolver problemas que requieren el uso de las leyes y ecuaciones que gobiernan los equilibrios de fases y los procesos electroquímicos.
- 2:** Establecer y obtener el número y tipo de variables que caracterizan un equilibrio de fases determinado.
- 3:** Describir los aspectos específicos de las técnicas más relevantes del estudio experimental del equilibrio de fases.

- 4:** Ser capaz de aplicar adecuadamente diferentes modelos teóricos con los que obtener propiedades y magnitudes del equilibrio de fases.
- 5:** Distinguir los parámetros más relevantes en los procesos de síntesis electroquímica y en la electrodeposición de metales.
- 6:** Explicar, describir y usar justificadamente métodos y equipos en el estudio de procesos electroquímicos.
- 7:** Identificar la contribución de los procesos electroquímicos en la remediación medioambiental y en la sostenibilidad química.

## Introducción

### Breve presentación de la asignatura

La asignatura obligatoria Química Física Avanzada se imparte en el primer cuatrimestre y tiene una carga docente de 6 créditos ECTS, siendo el 50% de las actividades presenciales teóricas y el otro 50% de carácter práctico. Cada alumno realizará también un trabajo individual que expondrá en clase.

La asignatura tiene como función principal proporcionar a los alumnos una formación avanzada sobre los aspectos prácticos, experimentales y teóricos más importantes de los Equilibrios de Fases, y las aplicaciones más importantes de la Electroquímica en relación con la síntesis orgánica e inorgánica, el electrodeposición de metales y otros tratamientos de superficies, convertidores electroquímicos de energía (pilas, baterías recargables y pilas de combustible), corrosión y procesos para la eliminación de contaminantes y remediación ambiental.

---

## 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:

Los objetivos que se plantean en esta asignatura corresponden a una intensificación de los conocimientos y habilidades en los campos específicos del área de Química Física siguientes:

- i) Equilibrio de Fases
- ii) Electroquímica Aplicada.

Estos campos tienen una especial relevancia tanto desde el punto de vista conceptual dentro de la Química como formativo en lo que se refiere a la adquisición por parte del alumno de conocimientos de alcance muy general y de habilidades prácticas y destrezas en el laboratorio, aplicables tanto a la Química Física como a otras áreas de conocimiento de la Química.

Los conocimientos adquiridos permitirán afrontar con garantías la resolución de problemas relacionados con el equilibrio de fases desde el punto de vista numérico, la obtención de las diversas magnitudes relacionadas con él (en particular, del equilibrio líquido-vapor), conocer los aspectos experimentales esenciales para su estudio (técnicas, equipos, modelos teóricos de correlación y predicción) y sus aplicaciones más usuales. En el caso de la Electroquímica, además de lo ya mencionado para el equilibrio de fases, se hará especial énfasis en sus novedosas aplicaciones desde el punto de vista medioambiental y de sostenibilidad.

#### Contexto y sentido de la asignatura en la titulación

La asignatura "Química Física Avanzada" se ubica en el módulo fundamental de la titulación. Profundiza en dos campos

propios del área de Química Física de especial relevancia por su amplia aplicación en procesos que se llevan a cabo en otros campos de la Química, así como dentro del contexto industrial.

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

- 1:** Conocer los métodos experimentales y teóricos que se utilizan actualmente para estudiar el equilibrio de fases.
  
- 2:** Manejar apropiadamente datos del equilibrio líquido-vapor a presión o temperatura constante, y los programas informáticos propios para el cálculo de las diferentes magnitudes del ELV.
  
- 3:** Aplicar las técnicas y los modelos del equilibrio de fases a problemas generales de la Química.
  
- 4:** Aplicar los fundamentos físico-químicos de la electroquímica que gobiernan los procesos de síntesis electroquímica, tratamiento electroquímico de superficies, electrodeposición de metales y corrosión.
  
- 5:** Seleccionar los métodos y equipamientos más adecuados y definir estrategias para la implementación de procesos concretos electroquímicos de interés.

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

La asignatura proporcionará al alumno una formación rigurosa y tremendamente actual en los campos del Equilibrio de Fases y de la Electroquímica, que le permitirá establecer estrategias alternativas y complementarias al trabajo de investigación que tradicionalmente se viene desarrollando en otras áreas de la Química, ya sea para su aplicación directa en el campo de las reacciones orgánicas e inorgánicas, de los nuevos materiales o de la separación e identificación de sustancias.

Concretamente, en lo relativo al conocimiento de los Diagramas de Fases y su modelización, la importancia de los resultados de aprendizaje radica en el conocimiento avanzado tanto teórico como práctico en ámbitos innovadores de procesos de separación, extracción o concentración de sustancias tanto con disolventes convencionales como con fluidos a presión y supercríticos. En el ámbito de la Electroquímica se espera alcanzar resultados relacionados con áreas de gran desarrollo actual (Química Sostenible) como son el diseño de procesos de electrosíntesis benignos con el medio ambiente, la prevención de la corrosión o el desarrollo de fuentes de energía como las pilas de combustible.

---

## **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 continua de la asignatura contendrá los siguientes apartados y contribuciones:
  1. Resolución de problemas y casos (40% de la calificación final). Estarán basados en los contenidos a los que se hacen referencia en las actividades de aprendizaje del apartado 5 de la guía.

2. Realización de informes de prácticas de laboratorio y de aula de informática (30% de la calificación final).
3. Realización y exposición de un trabajo individual (30% de la calificación final).

Los criterios en la evaluación de la exposición de trabajos serán los siguientes:

- Tratamiento de la búsqueda científica (profundidad, criterios de selección, fuentes empleadas, etc.): 30 % de la puntuación del apartado.

- Capacidad de síntesis y análisis (presentación de objetivos, relación con los apartados del temario, adecuación de la extensión del trabajo, visión crítica, etc.): 40% de la puntuación del apartado.

- Habilidades orales y técnicas (estructura del trabajo, calidad de la presentación, capacidad expositiva, dominio del lenguaje y de la terminología, etc.): 30% de la puntuación del bloque.

La asistencia a las clases prácticas es obligatoria, así como la entrega de los informes y trabajos solicitados dentro del plazo establecido por el profesor.

**2:** Quienes no opten por la evaluación continua, no superen la asignatura por ese procedimiento o deseen mejorar su calificación podrán optar a realizar una prueba global que supondrá el 100 % de la calificación.

**3:** El número de convocatorias oficiales de examen a las que la matrícula da derecho, así como el sistema de evaluación y calificación se ajustarán a la normativa vigente en la Universidad de Zaragoza.

[http://wzar.unizar.es/servicios/maste/docum/rto\\_%20permanencia14.pdf](http://wzar.unizar.es/servicios/maste/docum/rto_%20permanencia14.pdf)

<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:**

El proceso de aprendizaje que se ha diseñado para esta asignatura se basa en la combinación de actividades de información o conceptuales con las de evaluación y resolución de casos prácticos y próximos a la realidad. Las actividades de tipo conceptual se combinarán de forma estratégica con las de tipo práctico asistencial y de trabajo autónomo para permitir un máximo aprovechamiento.

En concreto se realizarán las siguientes actividades presenciales:

Clases Magistrales (30h) - Resolución de problemas y casos (15h) - Prácticas de Laboratorio (15 h)

Adicionalmente, el estudiante dispondrá de 90 horas no presenciales para el estudio de la materia y la realización de los trabajos e informes que sean pertinentes.

Las clases magistrales serán expositivas, y en ellas se desarrollarán los aspectos fundamentales de la asignatura mediante la utilización de los medios audiovisuales necesarios. En las clases de problemas y casos se fomentará y valorará la participación activa del alumno.

En las clases prácticas de laboratorio y aula informática se pondrá especial atención al correcto manejo del instrumental, las técnicas y programas informáticos para la obtención de datos experimentales, su validación y posterior uso en el cálculo de magnitudes de interés. La atención se realizará de forma individualizada y en grupos reducidos, para una mejor comprensión de la materia.

Se propondrá la realización de un trabajo, que el alumno deberá elaborar individualmente y exponer en clase.

## 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:

### 1.- Clases magistrales

Contenido de las sesiones:

#### **Bloque 1: Equilibrio de Fases**

1. Fundamentos termodinámicos del equilibrio de fases.
2. Equilibrio líquido-vapor a bajas y a altas presiones.

Técnicas experimentales

Modelos teóricos: Correlación de datos - Métodos de predicción (Contribución de grupos, Ecuaciones de estado (EOS), Combinación EOS + función de exceso, Métodos estadísticos (de perturbaciones, SAFT...)

3. Otros equilibrios de fases (S-L, L-L, S-G)
4. Aplicaciones del equilibrio de fases: separación; extracción, reacción.

#### **Bloque 2: Electroquímica**

1. Síntesis electroquímica: fundamentos, metodología y equipamiento. Procesos tradicionales y avanzados.
2. Electrodeposición de metales y tratamiento electroquímico de superficies: fundamentos, operaciones e instalaciones. Últimos avances.
3. Corrosión: tipos, medida y prevención. Casos prácticos.
4. Convertidores electroquímicos de energía: pilas y baterías. Pilas de combustible.
5. Electroquímica, medio ambiente y sostenibilidad.

### 2.- Resolución de Problemas y Casos/Prácticas de Laboratorio

Contenido de las sesiones:

Resolución individualizada en clase pequeña de problemas avanzados de electroquímica y del equilibrio de fases en fluidos a bajas y altas presiones mediante apoyo de herramientas informáticas como Excel y PE-2000.

- Demostración de las técnicas experimentales de trabajo con fluidos a presión y supercríticos.

### 3.- Estudio y realización de trabajos

Trabajo autónomo del estudiante para la realización de los trabajos, ejercicios o informes solicitados.

## Planificación y calendario

### Calendario de sesiones presenciales y presentación de trabajos

Impartición de las Clases Magistrales de la asignatura: septiembre-enero.

Impartición de los Problemas o Prácticas asistidas por ordenador: noviembre-diciembre.

Exposición de Trabajos: diciembre-enero.

Entrega de materiales asociados a las actividades formativas: noviembre-enero a través del ADD.

Los horarios de las clases se publican en la página web de la Facultad de Ciencias.

## **Bibliografía**

### **BIBLIOGRAFÍA BÁSICA**

1. Termodinámica Química (2ª edición). J. A. Rodríguez Renuncio, J. J. Ruiz Sánchez y J. S. Urieta Navarro. Ed Síntesis 2000.
2. Classical Thermodynamics of Nonelectrolyte Solutions. H. C. van Ness y M. M. Abbott. Ed. McGraw-Hill 1982.
3. The Properties of Gases and Liquids, B.E. Poling, J.M. Prausnitz, J.P. O'Connell, McGraw Hill 5<sup>th</sup> edition 2007.
4. Termodinámica Molecular de los Equilibrios de Fases. J. M. Prausnitz; R. N. Lichtenthaler y E. Gomes de Azevedo. Ed. Prentice-Hall 2000
5. Electroquímica Moderna. J. O'M. Bockris y A. K. N. Reddy. Ed. Reverté 1980.
6. Electrochemistry. C.H. Hamann, A. Hamnett y W. Vielstich. Wiley-VCH 1998.

### **BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA**

1. Supercritical Fluids. Fundamentals for application. E. Kiran y J. M. H. Levelt Sengers. Kluwer Academic Publishers 2000.
2. Supercritical Fluid Extraction (2<sup>nd</sup> edition). M. McHugh y V. Krukonsis. Ed. Butterworth-Heinemann 1994.
3. Fundamental of Supercritical Fluids. T. Clifford. Oxford Science Publications 1999.
4. Thermodynamic Properties of Complex Fluid Mixtures. Research Report G. Maurer. Deutsche Forschungsgemeinschaft. Wiley-VCH 2004.
5. Electrochemistry. Principles, methods and applications. C.M.A. Brett y A.M. Oliveira Brett. Oxford University Press 1993.
6. Control de la corrosión. Estudio y medida por técnicas electroquímicas. J. A. González Fernández. C.S.I.C. 1989.
7. Electrosíntesis y electrodiálisis. Fundamentos, aplicaciones tecnológicas y tendencias. J.R. Ochoa Gómez. McGraw-Hill 1996.

## **Referencias bibliográficas de la bibliografía recomendada**