



Guía Docente				
Datos Identificativos				2012/13
Asignatura (*)	Química Física	Código	610311202	
Titulación				
Descritores				
Ciclo	Período	Curso	Tipo	Créditos
1º e 2º Ciclo	Anual	Segundo	Troncal	9.5
Idioma	Castelán			
Prerrequisitos				
Departamento	Química Física e Enxeñaría Química 1			
Coordinación	Rodríguez Barro, Pilar	Correo electrónico	pilar.rbarro@udc.es	
Profesorado	Rodríguez Barro, Pilar	Correo electrónico	pilar.rbarro@udc.es	
Web	ciencias.udc.es			
Descrición xeral	<p>La Química Física es el estudio de los principios físicos fundamentales que gobiernan las propiedades y el comportamiento de los sistemas químicos. Un sistema químico puede estudiarse desde un punto de vista microscópico o macroscópico. En este primer curso de Química Física se introduce la metodología del estudio microscópico de los átomos y las moléculas (Química Cuántica), la metodología del estudio macroscópico de equilibrio (Termodinámica Química) así como la velocidad de las reacciones químicas (Cinética Química).</p> <p>Los contenidos que se imparten en esta asignatura constituyen los fundamentos teóricos imprescindibles para las siguientes asignaturas de Química Física y un marco de referencia para todas las demás ramas de la Química que, necesariamente, aplican buena parte de los conceptos estudiados en esta asignatura en el desarrollo de sus programas específicos.</p>			

Competencias da titulación	
Código	Competencias da titulación

Resultados da aprendizaxe			
Competencias de materia (Resultados de aprendizaxe)	Competencias da titulación		
Coñecer os Principios da Termodinámica e as súas aplicacións en Química.	A1 A3 A5 A14 A15 A16 A20 A21 A24	B1 B2 B3 B4 B5 B7	C1 C3 C6
Coñecer os principios da Química Cuántica	A1 A8 A14 A15 A16 A20	B1 B2 B3 B4 B5	C3 C6 C8



Coñecer os principios da Cinética Química	A1 A4 A10 A14 A15 A16 A20 A21 A24	B1 B2 B3 B4 B5 B7	C1 C2 C6 C7
Resolver problemas complexos mediante o emprego de follas de cálculo.	A1 A14 A15 A16 A20 A21 A24	B1 B2 B3 B4 B5 B7	C1 C3 C6
Destreza na búsqueda bibliográfica de aplicacións reais e de investigación sobre os contidos da materia.	A14 A15 A16 A20 A21 A24 A25	B1 B3 B4 B7	C1 C2 C3 C6 C7 C8

Contidos	
Temas	Subtemas
A. TERMODINÁMICA QUÍMICA	
0. Conceptos previos y propiedades matemáticas	Ecuación para el diferencial total <ul style="list-style-type: none"> - Fórmulas de conversión entre derivadas parciales - Diferenciales exactas
1. Primera ley de la termodinámica	Energía interna y entalpía <ul style="list-style-type: none"> - Capacidades caloríficas
2. Segunda ley de la termodinámica	La entropía <ul style="list-style-type: none"> - Cálculo de la diferencia de entropía en algunos sistemas
3. Potenciales termodinámicos y evolución de los sistemas	Condiciones de equilibrio en sistemas cerrados: funciones de Gibbs y Helmholtz <ul style="list-style-type: none"> - Relación de las funciones de Gibbs y Helmholtz con el trabajo - Relaciones termodinámicas para un sistema cerrado - Algunas aplicaciones y ejemplo del uso de las ecuaciones anteriores - Ecuaciones de estado termodinámicas - Diferencia entre las capacidades caloríficas - Variación de C_p con la presión y de C_v con el volumen - Relación entre G y H
4. Tercer principio de la termodinámica	Necesidad de la tercera ley de la termodinámica <ul style="list-style-type: none"> - Formulación de la tercera ley de la termodinámica - Determinación de entropías convencionales



5. Funciones termodinámicas normales de reacción	Entalpía standar de reacción: leyes de Hess y de Kirchhoff <ul style="list-style-type: none">- Entropía standar de reacción y su variación con la temperatura- Energía de Gibbs estandar de reacción: ecuación de Gibbs-Helmholtz
6. Termodinámica de sistemas de composición variable	- Ecuación de Gibbs para sistemas abiertos: el potencial químico <ul style="list-style-type: none">- Propiedades del potencial químico- Condiciones de equilibrio material<ul style="list-style-type: none">Equilibrio de fasesEquilibrio químico
7. Propiedades molares parciales	Definición <ul style="list-style-type: none">- Determinación de las magnitudes molares parciales<ul style="list-style-type: none">Métodos analíticosMétodos gráficos
8. Termodinámica de gases	El gas ideal <ul style="list-style-type: none">Potencial químico y propiedadesMezcla de gases idealesPotenciales químicos en una mezcla de gases idealesFunciones de mezcla para gases ideales- Gases reales<ul style="list-style-type: none">Ecuaciones de estado y fugacidad
9. Equilibrio de fases en sistemas de un componente	- La regla de las fases. <ul style="list-style-type: none">Diagramas de fase para sistemas de un componenteEcuaciones de Clapeyron y Clausius-ClapeyronDependencia de la presión de vapor con la presión total: Ec. de Poynting.Clasificación de las transiciones de fase
10. Disoluciones	Disolución ideal. Ley de Raoult. <ul style="list-style-type: none">- Disolución diluida ideal. Ley de Henry.- Funciones de mezcla de disoluciones ideales.- Disoluciones no ideales de no electrólitos<ul style="list-style-type: none">Disoluciones no ideales de no electrólitos- Actividad y coeficientes de actividad: convenios- Coeficientes de actividad y leyes de Raoult y Henry<ul style="list-style-type: none">Aplicación de la ecuación de Gibbs-DuhemCoeficiente de actividad del soluto en distintas escalasFunciones de exceso- Disoluciones de electrólitos. Coeficiente de actividad de especies iónicas



11. Equilibrios de fase en sistemas de dos componentes	Disolución ideal a temperatura constante Disolución ideal a presión constante Destilación fraccionada Mezclas azeotrópicas - Equilibrio líquido-líquido en sistemas con dos componentes - Diagramas de equilibrio sólido-líquido en sistemas con dos componentes - Diagramas temperatura-composición sin formación de compuestos: diagrama eutéctico simple - Diagrama de temperatura de congelación con formación de compuesto - Compuestos con temperaturas de fusión incongruentes - Análisis térmico - Equilibrio entre una disolución diluida ideal y un componente cristalino puro Solubilidad ideal de sólidos en líquidos. Descenso crioscópico. - Presión osmótica. - Ley de distribución de Nernst.
12. Equilibrio químico	Equilibrio químico entre gases La constante de equilibrio Energía de Gibbs de reacción y constante de equilibrio Desplazamiento del equilibrio: principio de Le Chatelier - Equilibrio químico en disoluciones de no electrólitos - Equilibrio químico en disoluciones de electrólitos - Equilibrio químico con sólidos o líquidos puros - Dependencia de la constante de equilibrio con la temperatura y la presión
13. Equilibrio electroquímico	Sistemas electroquímicos - Termodinámica de sistemas electroquímicos. El potencial electroquímico - Celdas electroquímicas Celdas galvánicas Células electrolítica - Ecuación de Nernst y Potenciales normales de electrodo - Tipos de electrodos reversibles - Clasificación de células galvánicas - Potenciales de unión líquida - Potenciales de membrana - Aplicaciones de la medida de la fuerza electromotriz Determinación de parámetros termodinámicos Medida del pH Valoraciones potenciométricas
B. QUÍMICA CUÁNTICA	
14. Teoría cuántica: orígenes y principios básicos	Antecedentes históricos de la Mecánica Cuántica. - Cuantización de la energía. - Hipótesis de De Broglie: Dualidad onda-corpúsculo de la materia. - Principio de incertidumbre de Heisenberg



15. Postulados de la Mecánica Cuántica	Primer postulado: estado de un sistema cuántico. Función de onda: significado físico. Normalización y ortogonalidad. - Segundo postulado: operador asociado a toda variable observable. Álgebra de operadores. Operador energía: hamiltoniano. - Tercer postulado: ecuación de valores propios. Función propia y valor propio de un operador. Operadores hermíticos. - Cuarto postulado: valor medio de una propiedad (valor esperado). - Quinto postulado: evolución temporal del estado de un sistema cuántico. Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo. - Conmutabilidad
16. Movimiento traslacional: la partícula en una caja	La partícula en una caja monodimensional: Funciones de onda y niveles de energía. - La partícula en una caja bidimensional: Separación de variables y degeneración. - La partícula en una caja tridimensional.
17. Movimiento vibracional: el oscilador armónico	Descripción clásica. - Tratamiento cuántico. Funciones de onda: Polinomios de Hermite. Simetría de las funciones de onda. Energía de vibración: niveles energéticos. - El oscilador armónico como modelo de vibración de moléculas. - Anarmonicidad.
18. Movimiento rotacional: el rotor rígido	- Descomposición del movimiento de dos partículas. - Tratamiento cuántico. Coordenadas esféricas. Movimiento de una partícula en una anillo. Funciones de onda: Polinomios de Legendre. Armónicos esféricos. Energía de rotación: niveles energéticos. - Cuantización del momento angular: Cuantización del módulo y del plano de giro.
19. Átomos hidrogenoides	Hamiltoniano y resolución de la ecuación de Schrodinger. Unidades atómicas. Funciones de onda radial y angular. Niveles energéticos. - Función de onda (orbital atómico) y función de distribución radial. - Funciones de onda reales: representación radial y angular. - Efecto Zeeman
20. Métodos aproximados	- Método de perturbaciones. - Método de variaciones. Teorema variacional. Función de prueba. - Funciones variacionales lineales: ecuaciones seculares.



21. Átomos polieletrónicos	<p>Estado fundamental del átomo de helio.</p> <p>Formulación cuántica: hamiltoniano y ecuación de Schrodinger.</p> <p>Solución de sistema aplicando el método de perturbaciones</p> <p>Solución del sistema aplicando el método variacional.</p> <p>Diferentes funciones de prueba: orbitales de Slater.</p> <p>Orbitales atómicos de campo autoconsistente: método Hartree-Fock (SCF-HF).</p> <ul style="list-style-type: none">- Momento angular de espin: función de onda completa.- Indistinguibilidad electrónica: Principio de Pauli. <p>Determinantes de Slater.</p> <p>Tabla Periódica.</p>
22. Espectroscopía atómica	<p>Configuración electrónica: niveles energéticos.</p> <ul style="list-style-type: none">- Momento angular orbital total: acoplamiento spin-orbita y acoplamiento j-j.- Términos atómicos. Reglas de Hund. Reglas de selección.
23. El enlace químico	<ul style="list-style-type: none">- La aproximación de Born-Oppenheimer.- Método de orbitales moleculares y de enlace de valencia.- Aplicación del método de orbitales moleculares al ion molécula de hidrógeno: H₂⁺. <p>Integral de solapamiento.</p> <p>Orbitales moleculares: enlazante y antienlazante.</p>
24. La molécula de hidrógeno	<ul style="list-style-type: none">- Método de enlace de valencia.- Método de orbitales moleculares.- Comparación de ambas teorías.
25. Moléculas diatómicas	<ul style="list-style-type: none">- Consideraciones generales para la formación de enlace.- Moléculas diatómicas homonucleares.- Moléculas diatómicas heteronucleares. <p>Enlace polar: electronegatividad.</p>
26. Moléculas poliatómicas	<ul style="list-style-type: none">- Método de orbitales moleculares.- Enlaces localizados: orbitales híbridos.- Hibridación sp, sp² y sp³.
27. Moléculas conjugadas y aromáticas	<ul style="list-style-type: none">- Métodos semiempíricos.- Aproximación pi-electrónica.- Método del electrón libre (FEMO).- Método de orbitales moleculares: aproximación Hückel. <p>Energía de resonancia o deslocalización.</p> <p>Índices de reactividad.</p> <p>Orden de enlace pi.</p> <p>Método alternativo para monociclos y moléculas lineales.</p>
C. CINÉTICA QUÍMICA	



28. Cinética Química: conceptos fundamentales	<ul style="list-style-type: none"> - Definición de velocidad de reacción. <ul style="list-style-type: none"> - Ecuación de velocidad. - Integración de ecuaciones de velocidad sencillas. - Determinación experimental de la ecuación de velocidad. <ul style="list-style-type: none"> Método de integración. Método del tiempo de semirreacción. Método de aislamiento. Método de velocidades iniciales. - Mecanismos de reacción. <ul style="list-style-type: none"> Intermedios de reacción. Etaqa elemental. Molecularidad. - Deducción de la ecuación de velocidad a partir del mecanismo. <ul style="list-style-type: none"> Aproximación de la etapa limitante. Aproximación del estado estacionario. - Influencia de la temperatura en las constantes cinéticas: ecuación de Arrhenius. - Relación entre constantes cinéticas y constantes de equilibrio.
---	---

Planificación

Metodoloxías / probas	Horas presenciais	Horas non presenciais / traballo autónomo	Horas totais
Proba mixta	0	0	0
Atención personalizada	0	0	0

*Os datos que aparecen na táboa de planificación son de carácter orientativo, considerando a heteroxeneidade do alumnado

Metodoloxías

Metodoloxías	Descrición
Proba mixta	Prueba escrita. Se evaluará el aprendizaje asociado a todos los contenidos de la asignatura.

Atención personalizada

Metodoloxías	Descrición
	<p>Se recomienda a los alumnos el uso de tutorías individualizadas para resolver todas las dudas, cuestiones y conceptos que se planteen durante el aprendizaje de la asignatura.</p> <p>Se impartirá en las 6 h de tutorías semanales de los profesores correspondientes.</p>

Avaliación

Metodoloxías	Descrición	Cualificación
Proba mixta	Prueba escrita. Se evaluará el aprendizaje asociado a todos los contenidos de la asignatura.	100

Observacións avaliación



La materia se dividirá en dos partes con evaluaciones independientes durante un mismo curso académico en las convocatorias de junio y septiembre.

La primera parte la constituyen los contenidos de Termodinámica del Programa de la Asignatura (Temas 0-13). La segunda parte abarca os contenidos de Química Cuántica y Cinética Química del Programa de la Asignatura (Temas 14-28).

IMPORTANTE:

 - Para superar la materia de cada uno de las partes, será necesario obtener un mínimo de 5 puntos sobre 10 puntos posibles

 - Para superar la asignatura en su conjunto es necesario haber superado la materia de cada uno de las partes.

 Convocatoria de septiembre:

 ? Se conservarán las calificaciones de las partes aprobadas en la convocatoria de junio, de manera que los alumnos sólo han de presentarse a la prueba escrita final de la parte de la materia no superada.

FECHAS:

CONVOCATORIA DE DICIEMBRE:10 de diciembre a las 10:00 en el aula 13

CONVOCATORIA DE JUNIO:13 de junio a las 10:00 en el aula 13

CONVOCATORIA DE SEPTIEMBRE: 5 de septiembre a las 10:00 en el aula 2

Fontes de información

Bibliografía básica

Bibliografía complementaria

Recomendacións

Materias que se recomienda ter cursado previamente

Técnicas Experimentais en Química Física/610311305

Cinetoquímica/610311405

Química Física Avanzada/610311501

Fisicoquímica da Auga/610311621

Materias que se recomienda cursar simultaneamente

Materias que continúan o temario

Física/610311101

Matemáticas/610311102

Enlace Químico e Estrutura da Materia/610311104

Observacións

(*A Guía docente é o documento onde se visualiza a proposta académica da UDC. Este documento é público e non se pode modificar, salvo casos excepcionais baixo a revisión do órgano competente dacordo coa normativa vixente que establece o proceso de elaboración de guías