



| 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 |    |    |
|  |                            | A1 | B1 |
| Coñecer os Principios da Termodinámica e as súas aplicacións en Química. | A3                         | B2 | C3 |
|  | A5                         | B3 | C6 |
|  | A14                        | B4 |    |
|  | A15                        | B5 |    |
|  | A16                        | B7 |    |
|  | A20                        |    |    |
|  | A21                        |    |    |
|  | A24                        |    |    |
| Coñecer os principios da Química Cuántica                                | A1                         | B1 | C3 |
|  | A8                         | B2 | C6 |
|  | A14                        | B3 | C8 |
|  | A15                        | B4 |    |
|  | A16                        | B5 |    |
|  | A20                        |    |    |



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

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



|  |   |
|--|---|
| 5. Funciones termodinámicas normales de reacción     | Entalpía standar de reacción: leyes de Hess y de Kirchhoff<br>- Entropía standar de reacción y su variación con la temperatura<br>- 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<br>- Propiedades del potencial químico<br>- Condiciones de equilibrio material<br>Equilibrio de fases<br>Equilibrio químico  |
| 7. Propiedades molares parciales                     | Definición<br>- Determinación de las magnitudes molares parciales<br>Métodos analíticos<br>Métodos gráficos   |
| 8. Termodinámica de gases                            | El gas ideal<br>Potencial químico y propiedades<br>Mezcla de gases ideales<br>Potenciales químicos en una mezcla de gases ideales<br>Funciones de mezcla para gases ideales<br>- Gases reales<br>Ecuaciones de estado y fugacidad   |
| 9. Equilibrio de fases en sistemas de un componente  | - La regla de las fases.<br>Diagramas de fase para sistemas de un componente<br>Ecuaciones de Clapeyron y Clausius-Clapeyron<br>Dependencia de la presión de vapor con la presión total: Ec. de Poynting.<br>Clasificación de las transiciones de fase  |
| 10. Disoluciones                                     | Disolución ideal. Ley de Raoult.<br>- Disolución diluida ideal. Ley de Henry.<br>- Funciones de mezcla de disoluciones ideales.<br>- Disoluciones no ideales de no electrólitos<br>Disoluciones no ideales de no electrólitos<br>- Actividad y coeficientes de actividad: convenios<br>- Coeficientes de actividad y leyes de Raoult y Henry<br>Aplicación de la ecuación de Gibbs-Duhem<br>Coeficiente de actividad del soluto en distintas escalas<br>Funciones de exceso<br>- Disoluciones de electrólitos. Coeficiente de actividad de especies iónicas |



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



|   |   |
|---|---|
| 15. Postulados de la Mecánica Cuántica                | Primer postulado: estado de un sistema cuántico.<br>Función de onda: significado físico.<br>Normalización y ortogonalidad.<br>- Segundo postulado: operador asociado a toda variable observable.<br>Álgebra de operadores.<br>Operador energía: hamiltoniano.<br>- Tercer postulado: ecuación de valores propios.<br>Función propia y valor propio de un operador.<br>Operadores hermíticos.<br>- Cuarto postulado: valor medio de una propiedad (valor esperado).<br>- Quinto postulado: evolución temporal del estado de un sistema cuántico. Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo.<br>- Conmutabilidad |
| 16. Movimiento traslacional: la partícula en una caja | La partícula en una caja monodimensional: Funciones de onda y niveles de energía.<br>- La partícula en una caja bidimensional: Separación de variables y degeneración.<br>- La partícula en una caja tridimensional.  |
| 17. Movimiento vibracional: el oscilador armónico     | Descripción clásica.<br>- Tratamiento cuántico.<br>Funciones de onda: Polinomios de Hermite.<br>Simetría de las funciones de onda.<br>Energía de vibración: niveles energéticos.<br>- El oscilador armónico como modelo de vibración de moléculas.<br>- Anarmonicidad.  |
| 18. Movimiento rotacional: el rotor rígido            | - Descomposición del movimiento de dos partículas.<br>- Tratamiento cuántico.<br>Coordenadas esféricas.<br>Movimiento de una partícula en una anillo.<br>Funciones de onda: Polinomios de Legendre. Armónicos esféricos.<br>Energía de rotación: niveles energéticos.<br>- Cuantización del momento angular: Cuantización del módulo y del plano de giro.   |
| 19. Átomos hidrogenoides                              | Hamiltoniano y resolución de la ecuación de Schrodinger.<br>Unidades atómicas.<br>Funciones de onda radial y angular.<br>Niveles energéticos.<br>- Función de onda (orbital atómico) y función de distribución radial.<br>- Funciones de onda reales: representación radial y angular.<br>- Efecto Zeeman   |
| 20. Métodos aproximados                               | - Método de perturbaciones.<br>- Método de variaciones.<br>Teorema variacional.<br>Función de prueba.<br>- 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"><li>- Momento angular de espin: función de onda completa.</li><li>- Indistinguibilidad electrónica: Principio de Pauli.</li></ul> <p>Determinantes de Slater.</p> <p>Tabla Periódica.</p> |
| 22. Espectroscopía atómica            | <p>Configuración electrónica: niveles energéticos.</p> <ul style="list-style-type: none"><li>- Momento angular orbital total: acoplamiento spin-orbita y acoplamiento j-j.</li><li>- Términos atómicos. Reglas de Hund. Reglas de selección.</li></ul>   |
| 23. El enlace químico                 | <ul style="list-style-type: none"><li>- La aproximación de Born-Oppenheimer.</li><li>- Método de orbitales moleculares y de enlace de valencia.</li><li>- Aplicación del método de orbitales moleculares al ion molécula de hidrógeno: H<sub>2</sub><sup>+</sup>.</li></ul> <p>Integral de solapamiento.</p> <p>Orbitales moleculares: enlazante y antienlazante.</p>  |
| 24. La molécula de hidrógeno          | <ul style="list-style-type: none"><li>- Método de enlace de valencia.</li><li>- Método de orbitales moleculares.</li><li>- Comparación de ambas teorías.</li></ul>   |
| 25. Moléculas diatómicas              | <ul style="list-style-type: none"><li>- Consideraciones generales para la formación de enlace.</li><li>- Moléculas diatómicas homonucleares.</li><li>- Moléculas diatómicas heteronucleares.</li></ul> <p>Enlace polar: electronegatividad.</p>  |
| 26. Moléculas poliatómicas            | <ul style="list-style-type: none"><li>- Método de orbitales moleculares.</li><li>- Enlaces localizados: orbitales híbridos.</li><li>- Hibridación sp, sp<sup>2</sup> y sp<sup>3</sup>.</li></ul>   |
| 27. Moléculas conjugadas y aromáticas | <ul style="list-style-type: none"><li>- Métodos semiempíricos.</li><li>- Aproximación pi-electrónica.</li><li>- Método del electrón libre (FEMO).</li><li>- Método de orbitales moleculares: aproximación Hückel.</li></ul> <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"> <li>- Definición de velocidad de reacción.               <ul style="list-style-type: none"> <li>- Ecuación de velocidad.</li> <li>- Integración de ecuaciones de velocidad sencillas.</li> <li>- Determinación experimental de la ecuación de velocidad.                   <ul style="list-style-type: none"> <li>Método de integración.</li> <li>Método del tiempo de semirreacción.</li> <li>Método de aislamiento.</li> <li>Método de velocidades iniciales.</li> </ul> </li> </ul> </li> <li>- Mecanismos de reacción.               <ul style="list-style-type: none"> <li>Intermedios de reacción.</li> <li>Etaqa elemental. Molecularidad.</li> </ul> </li> <li>- Deducción de la ecuación de velocidad a partir del mecanismo.               <ul style="list-style-type: none"> <li>Aproximación de la etapa limitante.</li> <li>Aproximación del estado estacionario.</li> </ul> </li> <li>- Influencia de la temperatura en las constantes cinéticas: ecuación de Arrhenius.</li> <li>- Relación entre constantes cinéticas y constantes de equilibrio.</li> </ul> |
|---|---|

### 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:**

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

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

&nbsp;Convocatoria de septiembre:

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

**FECHAS:**&nbsp;

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