



| Guía Docente | | | | |
|-----------------------|---|--------------------|---------------------|----------|
| Datos Identificativos | | | | 2012/13 |
| Asignatura (*) | Química Física | Código | 610311202 | |
| Titulación | Licenciado en Química | | | |
| 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 |
| A1 | Utilizar a terminoloxía química, nomenclatura, convenios e unidades. |
| A3 | Coñecer as características dos diferentes estados da materia e as teorías empregadas para describilos. |
| A4 | Coñecer os tipos principais de reacción química e as súas principais características asociadas. |
| A5 | Comprender os principios da termodinámica e as súas aplicacións en Química. |
| A8 | Coñecer os principios da Mecánica Cuántica e a súa aplicación á estrutura de átomos e moléculas. |
| A10 | Coñecer a cinética do cambio químico, incluíndo a catálise e os mecanismos de reacción. |
| A14 | Demostrar o coñecemento e comprensión de conceptos, principios e teorías relacionadas coa Química. |
| A15 | Recoñecer e analizar novos problemas e planear estratexias para solucionarlos. |
| A16 | Adquirir, avaliar e utilizar os datos e información bibliográfica e técnica relacionada coa Química. |
| A20 | Interpretar os datos procedentes de observacións e medidas no laboratorio. |
| A21 | Comprender os aspectos cualitativos e cuantitativos dos problemas químicos. |
| A24 | Explicar, de xeito comprensible, fenómenos e procesos relacionados coa Química. |
| A25 | Relacionar a Química con outras disciplinas e recoñecer e valorar os procesos químicos na vida diaria. |
| B1 | Aprender a aprender. |
| B2 | Resolver problemas de forma efectiva. |
| B3 | Aplicar un pensamento crítico, lóxico e creativo. |
| B4 | Traballar de forma autónoma con iniciativa. |
| B5 | Traballar de forma colaborativa. |
| B7 | Comunicarse de maneira efectiva nun entorno de traballo. |
| C1 | Expresarse correctamente, tanto de forma oral coma escrita, nas linguas oficiais da comunidade autónoma. |
| C2 | Dominar a expresión e a comprensión de forma oral e escrita dun idioma estranxeiro. |
| C3 | Utilizar as ferramentas básicas das tecnoloxías da información e as comunicacións (TIC) necesarias para o exercicio da súa profesión e para a aprendizaxe ao longo da súa vida. |
| C6 | Valorar criticamente o coñecemento, a tecnoloxía e a información dispoñible para resolver os problemas cos que deben enfrontarse. |
| C7 | Asumir como profesional e cidadán a importancia da aprendizaxe ao longo da vida. |



| | |
|----|---|
| C8 | Valorar a importancia que ten a investigación, a innovación e o desenvolvemento tecnolóxico no avance socioeconómico e cultural da sociedade. |
|----|---|

| 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 <ul style="list-style-type: none">Disolución ideal a presión constanteDestilación fraccionadaMezclas 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<ul style="list-style-type: none">Solubilidad ideal de sólidos en líquidos.Descenso crioscópico.- Presión osmótica.- Ley de distribución de Nernst. |
| 12. Equilibrio químico | Equilibrio químico entre gases <ul style="list-style-type: none">La constante de equilibrioEnergía de Gibbs de reacción y constante de equilibrioDesplazamiento 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 | <p>Sistemas electroquímicos</p> <ul style="list-style-type: none">- Termodinámica de sistemas electroquímicos. El potencial electroquímico- Celdas electroquímicas<ul style="list-style-type: none">Celdas galvánicasCélulas 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<ul style="list-style-type: none">Determinación de parámetros termodinámicosMedida del pHValoraciones potenciométricas |
| B. QUÍMICA CUÁNTICA | |
| 14. Teoría cuántica: orígenes y principios básicos | <p>Antecedentes históricos de la Mecánica Cuántica.</p> <ul style="list-style-type: none">- 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 | <p>Primer postulado: estado de un sistema cuántico.</p> <p>Función de onda: significado físico.</p> <p>Normalización y ortogonalidad.</p> <ul style="list-style-type: none">- Segundo postulado: operador asociado a toda variable observable.<ul style="list-style-type: none">Álgebra de operadores.Operador energía: hamiltoniano.- Tercer postulado: ecuación de valores propios.<ul style="list-style-type: none">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 | <p>La partícula en una caja monodimensional: Funciones de onda y niveles de energía.</p> <ul style="list-style-type: none">- La partícula en una caja bidimensional: Separación de variables y degeneración.- La partícula en una caja tridimensional. |
| 17. Movimiento vibracional: el oscilador armónico | <p>Descripción clásica.</p> <ul style="list-style-type: none">- Tratamiento cuántico.<ul style="list-style-type: none">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 | <ul style="list-style-type: none">- Descomposición del movimiento de dos partículas.<ul style="list-style-type: none">- Tratamiento cuántico. Coordenadas esféricas. Movimiento de una partícula en un 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 | <p>Hamiltoniano y resolución de la ecuación de Schrodinger.</p> <p>Unidades atómicas. Funciones de onda radial y angular. Niveles energéticos.</p> <ul style="list-style-type: none">- Función de onda (orbital atómico) y función de distribución radial.- Funciones de onda reales: representación radial y angular.- Efecto Zeeman |
| 20. Métodos aproximados | <ul style="list-style-type: none">- Método de perturbaciones.<ul style="list-style-type: none">- Método de variaciones. Teorema variacional. Función de prueba.- Funciones variacionales lineales: ecuaciones seculares. |
| 21. Átomos polielectrónicos | <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. Orbitales atómicos de campo autoconsistente: método Hartree-Fock (SCF-HF).</p> <ul style="list-style-type: none">- Momento angular de espín: función de onda completa.- Indistinguibilidad electrónica: Principio de Pauli. Determinantes de Slater. Tabla Periódica. |
| 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⁺. Integral de solapamiento. Orbitales moleculares: enlazante y antienlazante. |
| 24. La molécula de hidrógeno | <ul style="list-style-type: none">- Método de enlace de valencia.<ul style="list-style-type: none">- 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. Enlace polar: electronegatividad. |
| 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. Energía de resonancia o deslocalización. Índices de reactividad. Orden de enlace pi. Método alternativo para monociclos y moléculas lineales. |
| C. CINÉTICA QUÍMICA | |
| 28. Cinética Química: conceptos fundamentales | <ul style="list-style-type: none"> - Definición de velocidad de reacción. - 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. Etaa 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 |
|---|
| <p>La materia se dividirá en dos partes con evaluaciones independientes durante un mismo curso académico en las convocatorias de junio y septiembre.</p> <p>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).</p> <p>IMPORTANTE:</p> <p>&nbsp;- Para superar la materia de cada uno de las partes, será necesario obtener un mínimo de 5 puntos sobre 10 puntos posibles</p> <p>&nbsp;- Para superar la asignatura en su conjunto es necesario haber superado la materia de cada uno de las partes.</p> <p>&nbsp;Convocatoria de septiembre:</p> <p>&nbsp;? 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.</p> <p>FECHAS:&nbsp;</p> <p>CONVOCATORIA DE DICIEMBRE: 10 de diciembre a las 10:00 en el aula 13</p> <p>CONVOCATORIA DE JUNIO: 13 de junio a las 10:00 en el aula 13</p> <p>CONVOCATORIA DE SEPTIEMBRE: 5 de septiembre a las 10:00 en el aula 2</p> |

| 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