

**Proyecto/Guía docente de la asignatura**

<b>Asignatura</b>	QUÍMICA FÍSICA III		
<b>Materia</b>	QUÍMICA FÍSICA		
<b>Módulo</b>			
<b>Titulación</b>	Grado en Química		
<b>Plan</b>	2010	<b>Código</b>	45957
<b>Periodo de impartición</b>	Primer cuatrimestre	<b>Tipo/Carácter</b>	Obligatoria
<b>Nivel/Ciclo</b>	Grado	<b>Curso</b>	Tercero
<b>Créditos ECTS</b>	6		
<b>Lengua en que se imparte</b>	Castellano		
<b>Profesor/es responsable/s</b>	Grupo A: Carmen Lavín Grupo B: Alberto Lesarri		
<b>Datos de contacto (E-mail, teléfono...)</b>	clavin@qf.uva.es lesarri@qf.uva.es		
<b>Departamento</b>	Química Física y Química Inorgánica		



## 1. Situación / Sentido de la Asignatura

### 1.1 Contextualización

La asignatura pertenece al grupo de asignaturas obligatorias de tercer curso, y se enmarca dentro de la materia de **Química Física**, formada también por las asignaturas de segundo curso **Química Física I** y **Química Física II** y la asignatura de tercer curso **Química Física IV**. Dentro del esquema del Plan de Estudios de Química, el bloque de Química Física es uno de los cuatro dedicados a materias específicas de Química que se cursan tras el bloque básico.

### 1.2 Relación con otras materias

La asignatura está directamente relacionada con las otras dos asignaturas de la materia (Química Física I y Química Física II) impartidas en segundo curso, así como la asignatura de segundo cuatrimestre de tercero (Química Física IV).

### 1.3 Prerrequisitos

Se requiere que el alumno conozca los conceptos básicos de Química, Física y Matemáticas introducidos en las materias correspondientes de primer curso. Es recomendable haber cursado las asignaturas Química Física I y Química Física II.



## 2. Competencias

### 2.1 Generales

De acuerdo con la Memoria del Grado las competencias generales que un futuro graduado en Química debe adquirir en esta asignatura incluyen, principalmente, las siguientes:

G.1- Ser capaz de comunicarse con corrección tanto de forma oral como escrita.

G.2- Ser capaz de resolver problemas tanto de naturaleza cualitativa como cuantitativa y de tomar decisiones.

G.3- Ser capaz de encontrar y manejar información, tanto de fuentes primarias como secundarias.

G.4- Ser capaz de trabajar de forma eficaz y autónoma mediante la planificación y la organización de su trabajo y de su tiempo.

G.8- Poseer los hábitos, capacidad de aprendizaje y autonomía necesarios para proseguir su formación posterior.

G.9- Conocer y apreciar las responsabilidades éticas y profesionales

Asimismo, en clase se potenciarán las siguientes competencias:

G.5- Ser capaz de trabajar en equipo, apreciando el valor de las ideas de otras personas para enriquecer un proyecto, sabiendo escuchar las opiniones de otros colaboradores.

G.6- Conseguir usar con destreza las tecnologías de la información, en lo que se refiere al software más habitual, recursos audiovisuales e Internet.

G.7- Alcanzar un manejo del idioma inglés suficiente para leer y comunicarse, en aspectos generales y también específicos de su campo científico.

### 2.2 Específicas

Las competencias específicas del Grado en Química se pueden dividir en aquellas que atañen al conocimiento y comprensión de la disciplina y en las que suponen la adquisición de habilidades y destrezas, tanto de tipo cognitivo como de tipo práctico. Entre ellas citamos:

1) Conocimiento de la disciplina:

EC.1- Conocer y manejar los aspectos principales de terminología química.

EC.2- Conocer la Tabla Periódica, su utilidad y las tendencias periódicas en las propiedades de los elementos.

EC.3- Conocer los modelos y principios fundamentales de enlace entre los átomos, los principales tipos de compuestos a que esto da lugar y las consecuencias en la estructura y propiedades de los mismos.

EC.4- Comprender los principios fisicoquímicos que rigen las reacciones químicas y conocer los tipos fundamentales de reacciones químicas.

EC.5- Conocer los principales tipos de compuestos orgánicos e inorgánicos

2) Habilidades y destrezas relacionadas con la Química:

Estas habilidades pueden ser de tipo cognitivo o práctico.

Principalmente:

EH.1- Ser capaz de demostrar el conocimiento y comprensión de conceptos, principios y teorías esenciales en relación con la química.



EH.2- Ser capaz de aplicar los conocimientos adquiridos a la resolución de problemas cualitativos y cuantitativos.

EH.3- Ser capaz de reconocer y analizar un problema y plantear estrategias para su resolución.

EH.4- Ser capaz de analizar, interpretar y evaluar información química y datos químicos.

De forma complementaria:

EH.5- Ser capaz de comunicar información química y argumentar sobre ella.

EH.6- Manejar las herramientas computacionales y de tecnología de la información básicas para el procesamiento de datos e información química.





### 3. Objetivos

Como resultado de la realización de las actividades formativas anteriores y teniendo en cuenta los contenidos propuestos en la Memoria del Grado para la asignatura, los alumnos han de ser capaces de:

- 1) Adquirir los conocimientos teóricos y experimentales necesarios para estudiar el comportamiento macroscópico de la materia a través de la aplicación de los principios de la Termodinámica Química, y su relación con las propiedades microscópicas a través de los principios de la Termodinámica Estadística.
- 2) Conocer las características de los diferentes estados de la materia y las teorías empleadas para describirlos.
- 3) Conocer las propiedades de las interfases líquido-vapor y sólido-gas.
- 4) Reconocer la importancia científica de la Química Física y su impacto en la sociedad industrial y tecnológica.
- 5) Comprender y utilizar la información bibliográfica y técnica referida a los fenómenos fisicoquímicos.

Estos resultados implican la adquisición, de forma completa o parcial de las competencias que se indican más arriba (algunas competencias se adquieren o perfeccionan a lo largo de todo el periodo formativo del grado).





#### 4. Contenidos y/o bloques temáticos

##### Bloque 1: "TERMODINÁMICA ESTADÍSTICA"

Carga de trabajo en créditos ECTS: 

##### a. Contextualización y justificación

El primer bloque docente revisa los aspectos fundamentales de la Termodinámica y presenta los principios básicos de la Termodinámica estadística y su aplicación a mezclas reactivas y no reactivas de gases ideales, sólidos y líquidos. La aproximación del curso pretende ofrecer una primera visión del método termodinámico estadístico. La presentación de la Termodinámica estadística se basa en su mayor parte en el colectivo canónico, restringido a sistemas cerrados. Se enfatiza el papel de la función de partición, examinando las aplicaciones a gases ideales y sólidos. Finalmente se introduce el tratamiento estadístico de gases reales y fases líquidas.

##### b. Objetivos de aprendizaje

1. Entender el objeto de la Termodinámica estadística y su relación con otras metodologías químico-físicas.
2. Distinguir entre micro y macroestados, así como los diferentes tipos de ensamblajes.
3. Introducir el principio de Boltzmann.
4. Conocer el concepto de colectivo, utilidad y aplicaciones.
5. Distinguir entre partículas clásicas y cuánticas, así como las diferencias entre estadísticas de Maxwell-Boltzmann, Fermi-Dirac y Bose-Einstein.
6. Conocer el concepto de función de partición, cálculo y propiedades.
7. Relacionar las funciones termodinámicas con la función de partición.
8. Deducir propiedades termodinámicas del gas ideal a partir de la función de partición.
9. Deducir las propiedades termodinámicas de mezclas reactivas y no reactivas de gases ideales, incluyendo la obtención de la constante de equilibrio de una reacción química.
10. Determinar capacidades caloríficas para sólidos.
11. Presentar el origen físico y la naturaleza de las principales fuerzas intermoleculares.
12. Describir el gas real en términos de la ecuación del virial.
13. Cuantificar la forma analítica de diferentes potenciales intermoleculares.
14. Introducir la función de distribución radial en la descripción de la fase líquida.
15. Conocer los aspectos generales de las teorías que describen los líquidos.

##### c. Contenidos

###### Lección 1. Fundamentos de Termodinámica Estadística

Objeto de la Termodinámica Estadística.- Macroestados y microestados.- Relación entre Termodinámica Clásica y Estadística. Principio de Boltzmann.- Distinguibilidad e indistinguibilidad: Estadísticas clásica y cuánticas.- Ley general de distribución.-Función de partición de la partícula.- Sistemas de partículas independientes: Energía y entropía.



### Lección 2. Colectivos de Gibbs

Colectivos.- Postulados.- Colectivo canónico. Probabilidad de los microestados (Probabilidad de un microestado en el colectivo canónico.- Función de partición canónica.- Propiedades termodinámicas en términos de la función de partición canónica.

### Lección 3. Función de Partición para Sistemas de Partículas No Interaccionantes

Función de partición canónica para un sistema de partículas no interaccionantes: partículas distinguibles e indistinguibles.- Niveles de energía moleculares.- Factorización de la función de partición molecular.- Función de partición de traslación.- Función de partición de rotación.- Función de partición de vibración.- Función de partición electrónica.- Función de partición nuclear.- Propiedades termodinámicas y función de partición.

### Lección 4. Propiedades Termodinámicas del Gas Ideal

Principio de equipartición de la energía.- Ecuación de estado de gases ideales.- Propiedades termodinámicas de gases monoatómicos.- Propiedades termodinámicas de gases diatómicos.- Propiedades termodinámicas de gases poliatómicos.- Mezclas de gases: Equilibrio químico.

### Lección 5. Fuerzas intermoleculares. Gases Reales

Ecuaciones de estado de los gases reales.- Fuerzas intermoleculares.- Potenciales empíricos moleculares: Potencial de esferas rígidas, foso cuadrado y de Lennard-Jones.- Gases Reales. Función de partición canónica. Integral de configuración. Segundo coeficiente del virial.

### Lección 6. Sólidos y Líquidos

Mecánica estadística de sólidos cristalinos: Modelos de Einstein y Debye.- Capacidad calorífica.- Líquidos. Función de distribución radial.

## d. Métodos docentes

---

La metodología docente de los dos bloques temáticos de la asignatura incluirá:

**1. Clases expositivas** o lecciones magistrales que presenten el desarrollo de los fundamentos teóricos. Las clases expositivas se complementarán con el uso de presentaciones visuales y el desarrollo en pizarra. En general, todos los desarrollos matemáticos se realizarán en pizarra para facilitar el seguimiento por el alumno. Las presentaciones, así como todo el material complementario, estarán disponibles con anterioridad en el *Campus Virtual* de la asignatura. Las exposiciones incluirán opcionalmente material audiovisual como videos docentes, así como demostraciones numéricas basadas en programas de cálculo simbólico (en particular MATHEMATICA). Se sugerirán páginas web con contenidos relacionados.

**2. Clases prácticas de problemas**, que desarrollarán la mayoría de los ejercicios propuestos para cada lección. Los ejercicios estarán disponibles en el *Campus Virtual*. La solución de los ejercicios prácticos se llevará a cabo en todos los casos por los alumnos en pizarra de forma programada y asistida por el profesor. Esto permitirá al alumno aplicar los conocimientos teóricos y los fundamentos físicos y matemáticos subyacentes, así como mejorar la interacción con el resto de los alumnos y el profesor. Las clases prácticas introducirán al alumno ocasionalmente en el uso de herramientas TIC de cálculo simbólico (MATHEMATICA). Las clases prácticas se llevarán a cabo después de cada lección permitiendo en todos los casos un número mínimo de días de estudio para su preparación.

**3. Clases de seminarios**, dedicadas a la resolución de consultas y dudas relacionadas con la asignatura.



**4. Cuestionarios** sobre bancos de preguntas relacionados con las lecciones. Los cuestionarios estarán disponibles a la terminación de la lección y se cumplimentarán directamente por el alumno a través de la plataforma MOODLE del Campus Virtual. La evaluación y la retroalimentación disponible en estos cuestionarios ayudarán al aprendizaje y a la fijación de contenido por parte del alumno, a la vez que permiten flexibilidad en el estudio. Los seminarios estarán disponibles durante una semana a la finalización de cada tema.

#### e. Plan de trabajo

---

En todos los bloques incluirá:

##### 1. ACTIVIDADES PRESENCIALES

- Clases expositivas** o magistrales por parte del profesor. Incluirá los fundamentos teóricos, físicos y químico-físicos, así como las herramientas matemáticas necesarias para el curso.
- Clases prácticas de resolución de problemas.** Se llevarán a cabo por parte de los alumnos, de forma rotativa, programada y asistida por el profesor.
- Clases de seminarios** para la resolución de dudas y problemas

##### 2. ACTIVIDADES NO PRESENCIALES

- Preparación**, ampliación y estudio del material docente
- Resolución de ejercicios** relacionados con la materia.
- Resolución de cuestionarios** en la plataforma del *Campus Virtual*.

##### 3. TUTORIZACIÓN PERSONALIZADA

- Tutorización personal** por parte del profesor, ayuda a la preparación de ejercicios y exámenes

#### f. Evaluación

---

La evaluación de los alumnos se realizará mediante:

- Seguimiento continuo a través de controles periódicos o evaluación de problemas, trabajos u otras actividades.
- Examen final. En la calificación final tendrá mayor peso la nota obtenida en el examen final.

#### g. Bibliografía básica

---

- I. Levine, **Fisicoquímica**, Vol. 2, Quinta Edición, McGraw-Hill (2004) o ediciones en inglés.
- P. W. Atkins, J. D. Paula, **Química Física**, Octava Edición, Ed. Médica Panamericana (2008).
- P. Reid, T. Engel, **Química Física**, Addison Wesley (2006) o ediciones en inglés.
- R. J. Silbey, R. A. Alberty, M. G. Bawendi, **Physical Chemistry**, Cuarta. Edición, Wiley (2004).
- I. Levine, **Problemas de Fisicoquímica**, McGraw-Hill (2005).

#### h. Bibliografía complementaria

---

- D. A. McQuarrie, J. D. Simon, **Molecular Thermodynamics**, Univ. Science Books (1999).
- T. L. Hill, **An Introduction to Statistical Thermodynamics**, Dover (1987)
- D. Chandler, **Introduction to Modern Statistical Mechanics**, Oxford (1987).
- R. S. Berry, S. A. Rice, J. Ross, **Physical Chemistry**, 2da. Edición, Oxford (2000).





### i. Recursos necesarios

Los recursos necesarios de aulas e infraestructura son proporcionados por la Facultad de Ciencias de la UVA. El campus Virtual está basado en MOODLE y es accesible de forma remota. La biblioteca de Campus del Aulario dispone del material bibliográfico necesario.

### j. Temporalización

CARGA ECTS	PERIODO PREVISTO DE DESARROLLO
Termodinámica Estadística	Semanas 1-10

## Bloque 2: "TERMODINÁMICA DE SUPERFICIES"

Carga de trabajo en créditos ECTS:

### a. Contextualización y justificación

El segundo bloque de la asignatura está dedicado al estudio de diferentes aspectos de termodinámica de superficies. El desarrollo pone de manifiesto las leyes que rigen estos fenómenos en interfaces líquido-vapor y sólido-gas, describiendo los fenómenos de capilaridad y adsorción.

### b. Objetivos de aprendizaje

1. Definir las propiedades de las interfaces líquido-vapor y sólido-gas.
2. Deducir la ecuación de Young-Laplace.
3. Introducir la capilaridad.
4. Describir los procesos de adsorción y distinguir entre fisorción y quimisorción.
5. Reconocer los diferentes modelos de adsorción y sus limitaciones.

### c. Contenidos

#### Lección 7. Termodinámica de la interfase líquido-vapor

Interfases.- Interfase líquido-vapor. Tensión superficial.- Interfases curvas. Ecuación de Young-Laplace. Presión de vapor en superficies curvas.- Capilaridad.- Sistemas multicomponentes: Modelo de Gibbs.- Tensioactivos

#### Lección 8. Adsorción

Interfase sólido-gas. Adsorción. Fisorción y quimisorción.- Isotermas de adsorción.- Isoterma de Langmuir.- Efecto de la temperatura sobre el equilibrio de adsorción.- Limitaciones de la isoterma de Langmuir.- Otras isotermas.

### d. Métodos docentes

Los mismos que para el bloque 1.



#### e. Plan de trabajo

---

El mismo que en el bloque 1.

#### f. Evaluación

---

Análoga a la del bloque 1.

#### g. Bibliografía básica

---

- I. Levine, **Fisicoquímica**, Vol. 2, Quinta Edición, McGraw-Hill (2004) o ediciones en inglés.
- P. W. Atkins, J. D. Paula, **Química Física**, Octava Edición, Ed. Médica Panamericana (2008).
- P. Reid, T. Engel, **Química Física**, Addison Wesley (2006) o ediciones en inglés.
- R. J. Silbey, R. A. Alberty, M. G. Bawendi, **Physical Chemistry**, Cuarta. Edición, Wiley (2004).
- I. Levine, **Problemas de Fisicoquímica**, McGraw-Hill (2005).

#### h. Bibliografía complementaria

---

- R. S. Berry, S. A. Rice, J. Ross, **Physical Chemistry**, 2da. Edición, Oxford (2000)

#### i. Recursos necesarios

---

Los mismos que se han mencionado para el Bloque 1.

#### j. Temporalización

---

CARGA ECTS	PERIODO PREVISTO DE DESARROLLO
Termodinámica de superficies	Semanas 11-15

### 5. Métodos docentes y principios metodológicos

---

Clases expositivas presenciales. Clases prácticas de problemas. Seminarios y tutorías con resolución de dudas acerca de la asignatura. Cuestionarios sobre bancos de preguntas relacionados con las lecciones. Los alumnos dispondrán en la plataforma MOODLE de la UVa de las presentaciones de los contenidos y colección de problemas para su uso en clase y trabajo personal. Los cuestionarios se cumplimentarán a través de la plataforma Moodle.

**6. Tabla de dedicación del estudiante a la asignatura**

ACTIVIDADES PRESENCIALES	HORAS	ACTIVIDADES NO PRESENCIALES	HORAS
Clases teórico-prácticas (T/M)	40	Estudio y trabajo autónomo individual	80
Clases prácticas de aula (A)	10	Estudio y trabajo autónomo grupal	10
Laboratorios (L)			
Prácticas externas, clínicas o de campo			
Seminarios (S)	5		
Tutorías grupales (TG)			
Evaluación	5		
Total presencial	<b>60</b>	Total no presencial	<b>90</b>

**7. Sistema y características de la evaluación**

INSTRUMENTO/PROCEDIMIENTO	PESO EN LA NOTA FINAL	OBSERVACIONES
Evaluación continua	20%	Estos porcentajes son orientativos; la nota del examen final siempre tendrá mayor peso en la calificación final.
Examen final en las fechas y convocatorias fijadas por la Facultad de Ciencias	80%	

**CRITERIOS DE CALIFICACIÓN**

- **Convocatoria ordinaria:**
  - Seguimiento continuo a través de controles periódicos o evaluación de problemas, trabajos u otras actividades.
  - Examen final. En la calificación final tendrá mayor peso la nota obtenida en el examen final.
- **Convocatoria extraordinaria:**
  - ...Examen Final

**8. Consideraciones finales**