



Asignatura:
Código:
Grupo:
Titulación:
Profesor/a:
Curso Académico:

1. ASIGNATURA / COURSE

1.1. Nombre / Course Title

QUÍMICA FÍSICA AVANZADA / **ADVANCED PHYSICAL CHEMISTRY**

1.2. Código / Course Code

12705

1.3. Tipo / Type of course

Troncal/ **Compulsory**

1.4. Nivel / Level of course

Grado / **Grade**

1.5. Curso / Year of course

Tercero/ **Third course**

1.6. Semestre / Semester

2º

1.7. Número de créditos / Number of Credits Allocated

4 créditos LRU, 3 ECTS

1.8. Requisitos Previos / Prerequisites

Se recomienda haber cursado con aprovechamiento las siguientes asignaturas de primer ciclo: “Fundamentos de Termodinámica”, “Química-Física”



Asignatura:
Código:
Grupo:
Titulación:
Profesor/a:
Curso Académico:

1.9. ¿ Es obligatoria la asistencia ? / [Is attendance to class mandatory?](#)

Si / Yes

1.10. Datos del profesor/a / profesores / [Faculty Data](#)

Grupo:31

Juan Carlos del Valle

Departamento: Química Física Aplicada
Facultad: Ciencias, C-2-203
Teléfono: 4263
e-mail: juan.valle@uam.es
Página Web:
Horario de Tutorías Generales: Se informará en clase

Grupo:36

Enrique Fatás
(coordinador)

Departamento: Química Física Aplicada
Facultad: Ciencias, C-2-602
Teléfono: 4732
e-mail: enrique.fatas@uam.es
Página Web:
Horario de Tutorías Generales: Se informará en clase

1.11. OBJETIVOS DEL CURSO /[OBJETIVE OF THE COURSE](#)

Adquisición de conocimientos

El objetivo general de esta asignatura es complementar el área de conocimiento de Química Física tratando principalmente sistemas que no están en equilibrio. Se comenzará describiendo los diferentes procesos de transporte desde el punto de vista molecular y macroscópico. Seguidamente se abordará el estudio de los fenómenos superficiales que ocurren en las interfases, tratándose con detalle las isotermas de adsorción así como los métodos más actuales para la caracterización estructural, morfológica y composición de superficies sólidas. El siguiente objetivo consistirá en introducir las diferentes clases de catálisis discutiendo el mecanismo de acción general de un catalizador. Por último se abordarán los sistemas coloidales y macromoleculares, explicando su estructura y propiedades desde el punto de vista de la Química Física



Asignatura:
Código:
Grupo:
Titulación:
Profesor/a:
Curso Académico:

Adquisición de competencias y destrezas

Desde esta asignatura pretendemos que el alumno adquiera la terminología básica en Química Física, que sepa utilizarla expresando las ideas con la precisión requerida en el ámbito científico, siendo capaz de establecer relaciones entre distintos conceptos y con otras áreas de conocimiento.

1.12. Contenidos del Programa / [Course Contents](#)

Esta asignatura se divide en cuatro bloques que se detallan a continuación

BLOQUE 1

En este bloque consideramos la aplicación de una perturbación externa a un sistema de forma que una de sus propiedades se desplace del equilibrio originándose un transporte de esta propiedad. Los fenómenos de transporte estudian la evolución de una propiedad del sistema en respuesta a una distribución de no equilibrio de la misma. Un concepto central es el del flujo, que aparecerá como respuesta a un gradiente y que tendrá un sentido opuesto a éste.

Los contenidos de este bloque se especifican a continuación:

FENÓMENOS DE TRANSPORTE.

Ecuación general de flujo. Difusión. Conductividad térmica. Viscosidad. Migración. Cálculo de la conductividad térmica, viscosidad y coeficiente de difusión. Término difusivo. Término convectivo. Término migratorio. Conductividad molar. Ley de la migración independiente de los iones. Números de transporte.

BLOQUE 2

En este bloque se aborda el estudio de los fenómenos superficiales que ocurren en las interfases. Se introduce la tensión superficial, se presenta la ecuación de Young-Laplace y se explica el fenómeno de la capilaridad, describiendo algunos métodos experimentales para calcular la tensión superficial. Se continúa describiendo la forma de empaquetarse las moléculas en una superficie. Se tratan las isoterms de quimisorción y fisorción y después de una pequeña introducción a las técnicas experimentales de crecimiento de superficies, se describen las técnicas tanto de microscopía como espectroscópicas para determinar estructuras de superficies sólidas.

Los contenidos de este bloque se especifican a continuación:



Asignatura:
 Código:
 Grupo:
 Titulación:
 Profesor/a:
 Curso Académico:

FENÓMENOS DE SUPERFICIE.

Superficie: Interfase. Tensión superficial. Interfase curva. Ecuación de Young –Laplace. Capilaridad: ángulo de contacto. Fuerzas de adhesión y cohesión. Medida experimental de la tensión superficial. Variación con la temperatura. Adsorción. Tipos de adsorción. Isotermas Langmuir, Freunlich, Temkin, BET. Cálculo de la entalpía de adsorción isostérica. Crecimiento de superficies: técnica de ultra-alto vacío. Determinación de estructuras superficiales. Técnicas espectroscópicas: XPS, UPS, Auger y Raman. Técnicas de microscopía: SEM, TEM, Túnel y Fuerzas. Técnicas de Difracción de electrones de baja energía.

BLOQUE 3

Este bloque se dedica a la catálisis. Se parte de los conocimientos de cinética química adquiridos en la asignatura denominada Química Física de segundo de curso.

Se introducen las distintas clases de catálisis y se discute el mecanismo de acción general de un catalizador. Se describe la catálisis homogénea, centrándose principalmente en la ácido-base. También se estudian reacciones de autocatálisis y reacciones enzimáticas. Se introduce la catálisis heterogénea utilizando las ecuaciones de las isotermas de adsorción obtenidos en el bloque 2. Se estudian los mecanismos más simples para una reacción bimolecular, uno implica la adsorción previa de los dos reactivos (mecanismo Langmuir-Hinshelwood) y otro que conlleva la reacción entre un reactivo adsorbido y otro en fase gas (mecanismo Langmuir-Rideal).

Los contenidos de este bloque se especifican a continuación

CATALISIS

Diferentes definiciones de catalizador. Clases de catálisis. Mecanismo general. Intermedios de Arrhenius e intermedios de Van't Hoff. Ecuación de Arrhenius, energía de activación de la reacción global. Catalisis homogénea. Catálisis ácido-base. Coeficientes catalíticos. Variación de la pseudoconstante global con el pH. Catálisis ácido-base específica y general. Mecanismos para la catálisis ácido-base. Autocatálisis. Catálisis enzimática. Complejo enzima-sustrato. Mecanismo de Michaelis –Menten. Catálisis heterogénea. Descripción del proceso catalítico en las superficies. Tipos de catalizadores. Mecanismo Langmuir-Hinshelwood. Mecanismo Langmuir-Rideal.



Asignatura:
Código:
Grupo:
Titulación:
Profesor/a:
Curso Académico:

BLOQUE 4

En este bloque se comienza describiendo un sistema coloidal. Se establecen diferencias entre soluciones, coloides y suspensiones y se presentan diferentes tipos de coloides en función del estado físico en que se encuentren la fase dispersa y el medio dispersante. Se clasifican según su afinidad al medio dispersante y se describen diferentes métodos de formación. Se plantean diferentes métodos de purificación, estabilización y precipitación de estos sistemas.

Este bloque continúa definiendo y clasificando a las macromoléculas. Se consideran los distintos tipos de reacciones de polimerización, se contempla la posibilidad de copolimerización y posteriormente se trata el problema de la polidispersidad de las masas molares. Se define masa molar promedio y se describen métodos experimentales para determinarlas. Por último en este bloque se estudian estructuras de macromoléculas indicando las diferentes fuerzas que originan el plegamiento de las macromoléculas.

Los contenidos de este bloque se detallan a continuación

COLOIDES Y MACROMOLÉCULAS

Importancia de los coloides. Concepto general de coloide y cristaloides. Diferencias entre disoluciones, coloides y suspensiones. Efecto Tyndall. Movimiento Browniano. Tipos de coloides. Coloides liofóbicos y liofílicos. Formación de partículas coloidales por dispersión y condensación. Purificación de las disoluciones coloidales. Comportamiento eléctrico de los coloides. Propiedades de adsorción de los coloides. Estabilidad de los coloides hidrófobos e hidrófilos. Precipitación de coloides. Descripción general de macromoléculas. Estructura química, tamaño y conformaciones. Polidispersidad y masa molar. Mecanismos, cinética y grado de polimerización. Polimerización por adición, condensación y con apertura de anillo. Propiedades coligativas, solubilidad, punto crítico, temperatura theta. Técnicas de caracterización: difusión de luz, osmometría, viscosimetría, difusión y sedimentación.

1.13. Referencias de Consulta Básicas / [Recommended Reading.](#)

- Química Física. P. Atkins and J. de Paula. Ed.. Oxford University Press
- Fisicoquímica. I.N. Levine. Ed. Mc Graw Hill
- The Basis and Applications of Heterogeneous Catalysis. Michael Bowker. Oxford Science
- Physical and Chemical Kinetics R. S. Berry, S. A. Rice, and J. Ross Ed. Oxford University Press
- Chemical Kinetics (3rd Edition) by Keith J. Laidler



Asignatura:
Código:
Grupo:
Titulación:
Profesor/a:
Curso Académico:

- The Feynman Lectures on Physics. R.F. Feynman. Ed. Benjamin Cummings. Vol. 1-3, 2008.
- Problemas de Química Física. Coordinadores J. Bertrán Rusca y J. Núñez Delgado. Ed. Delta Publicaciones, 2006.

2 Métodos Docentes / Teaching methods

Actividades presenciales

Clases teóricas.

La enseñanza de esta asignatura se estructura principalmente en clases de teoría y seminarios. Los contenidos básicos necesarios para desarrollar y resolver las cuestiones planteadas al alumno se impartirán en forma de lecciones magistrales.

Clases prácticas

Estas clases prácticas serán destinadas a resolver problemas numéricos relacionados con las diferentes temáticas propuestas en los contenidos de la asignatura. La resolución de estos problemas afianzará los conceptos presentados en las clases teóricas y dará un contenido práctico a éstos, ya que se intentará que se asemejen a problemas que pueden presentarse a un químico en el desempeño de su profesión.

Actividades dirigidas

Trabajos individuales y / o en grupo.

Docencia en red.

Tutorías.



Asignatura:
Código:
Grupo:
Titulación:
Profesor/a:
Curso Académico:

3 Tiempo estimado de Trabajo del Estudiante / **Estimated workload for the student**

Asistencia a clase: 30 horas curso
Estudio preparación de clase: 30 horas
Estudio preparación de exámenes: 15 horas

Total 75 horas
 $75/3 = 25$ horas/crédito

4 Métodos de Evaluación y Porcentaje en la Calificación Final / **Assessment Methods and Percentage in the Final marks**

Descripción detallada del procedimiento para la evaluación
La evaluación de los estudiantes se hará mediante un examen que constará de problemas y teoría. La nota resultante de este ejercicio será modulada mediante la evaluación de los trabajos individuales así como la participación activa en las clases prácticas y seminarios.

Porcentaje en la calificación final
La calificación final el resultado de realizar la siguiente operación:
 $0.80 * \text{Nota examen final (Problemas + Teoría)} + 0.20 * \text{Nota del trabajo personalizado}$. Será condición necesaria para aprobar la asignatura, obtener una calificación mínima de 5 sobre 10 en el examen final.



Asignatura:
Código:
Grupo:
Titulación:
Profesor/a:
Curso Académico:

5 Cronograma de Actividades (opcional) / Activities Chronogram (optional)

Bloque 1: Fenómenos de Transporte
Bloque 2: Fenómenos de Superficie
Bloque 3: Catálisis
Bloque 4: Coloides y Macromoléculas

Semanas 1, 2, 3 y 4
Semanas 5, 6 y 7
Semanas 8, 9 y 10
Semanas 11 y 12