

Guia docent de l'assignatura "Termodinàmica Química"

2011/2012

Codi: 102502

Crèdits ECTS: 6

Titulació	Pla	Tipus	Curs	Semestre
2502444 Química	953 Graduat en Química	OB	2	2

Contacte

Nom : Gonzalo Guirado López

Email : Gonzalo.Guirado@uab.cat

Utilització d'idiomes

Llengua vehicular majoritària: català (cat)

Algun grup íntegre en anglès: No

Algun grup íntegre en català: Sí

Algun grup íntegre en espanyol: No

Prerequisits

Fonaments de Química

Experimentació i Documentació en Química

Objectius i contextualització

L'assignatura Termodinàmica Química és una assignatura obligatòria de 6 crèdits ECTS de segon curs, segon semestre.

L'objectiu d'aquesta assignatura és que l'alumne avanci en la seva formació en Química Física. En les assignatures de Fonaments de Química i Química Quàntica l'alumne haurà adquirit coneixements macroscòpics bàsics de Termodinàmica i microscòpics de Quàntica. En aquesta assignatura es pretén aprofundir en l'aplicació de les lleis de la Termodinàmica a sistemes químics concrets, utilitzant el concepte de potencial químic en sistemes homogenis o heterogenis d'un o més components. D'altra banda també es vol introduir la complementaritat de les visions macroscòpiques i microscòpiques dels sistemes per calcular les seves propietats termodinàmiques utilitzant els principis i bases de la Termodinàmica i de la Termodinàmica Estadística.

Competències i resultats d'aprenentatge

1955:E01 - Demostrar que es comprenen els conceptes, els principis, les teories i els fets fonamentals de les diferents àrees de la química.

1955:E01.31 - Explicar els principis de termodinàmica clàssica i les seves aplicacions en química.

1955:E01.32 - Enumerar i descriure les bases de la termodinàmica estadística.

1955:E01.33 - Relacionar propietats macroscòpiques i propietats d'àtoms i molècules individuals.

1955:E02 - Aplicar els coneixements químics a la resolució de problemes de naturalesa quantitativa o qualitativa en àmbits familiars i professionals.

1955:E02.20 - Reconèixer en processos naturals o industrials els fenòmens d'intercanvis d'energia i les lleis que els governen.

1955:E02.21 - Relacionar un model teòric amb els fenòmens d'equilibris químics.

1955:E02.22 - Definir amb bases entròpiques l'espontaneïtat d'un procés.

1955:E02.23 - Interpretar els comportaments moleculars i els fenòmens d'equilibri en gasos ideals.

1955:E02.24 - Utilitzar els conceptes i les formulacions dels potencials químics i electroquímics en processos reals.

1955:E02.25 - Aplicar els models esmentats amb finalitats predictives sabent-ne valorar les limitacions.

1955:E03 - Reconèixer i analitzar problemes químics i plantejar respostes o treballs adequats per a resoldre-los.

1955:E03.08 - Analitzar i resoldre problemes d'índole termodinàmica.

1955:E06 - Interpretar les dades obtingudes mitjançant mesures experimentals, incloent-hi l'ús d'eines informàtiques; identificar-ne el significat i relacionar les dades amb les teories químiques, físiques o biològiques apropiades.

1955:E06.06 - Aplicar els aspectes teòrics dels equilibris de fases per entendre els processos de destil·lacions.

1955:E06.07 - Entendre com la presència de solut afecta les propietats de les dissolucions.

1955:E09 - Emprar correctament la llengua anglesa en l'àmbit de la química.

1955:E09.03 - Identificar les denominacions angleses de la variables fisicoquímiques fonamentals.

1955:E09.04 - Utilitzar les denominacions angleses dels diferents estats de la matèria i dels seus canvis.

1955:E09.05 - Resumir un text científic relacionat amb l'assignatura, en llengua anglesa

1955:T01 - Comunicar-se oralment i per escrit en la llengua pròpia.

1955:T01.00 - Comunicar-se oralment i per escrit en la llengua pròpia.

1955:T02 - Gestionar l'organització i la planificació de tasques.

1955:T02.00 - Gestionar l'organització i la planificació de tasques.

1955:T03 - Resoldre problemes i prendre decisions.

1955:T03.00 - Resoldre problemes i prendre decisions.

1955:T04 - Obtenir informació, incloent-hi la utilització de mitjans telemàtics.

1955:T04.00 - Obtenir informació, incloent-hi la utilització de mitjans telemàtics.

1955:T05 - Gestionar, analitzar i sintetitzar informació.

1955:T05.00 - Gestionar, analitzar i sintetitzar informació.

1955:T06 - Utilitzar la informàtica per al tractament i presentació d'informació.

1955:T06.00 - Utilitzar la informàtica per al tractament i presentació d'informació.

1955:T07 - Tenir destresa per al càlcul numèric.

1955:T07.00 - Tenir destresa per al càlcul numèric.

1955:T10 - Operar amb un cert grau d'autonomia i integrar-se en poc temps en l'ambient de treball.

1955:T10.00 - Operar amb un cert grau d'autonomia i integrar-se en poc temps en l'ambient de treball.

1955:T11 - Raonar de forma crítica.

1955:T11.00 - Raonar de forma crítica.

1955:T12 - Mantenir un compromís ètic.

1955:T12.00 - Mantenir un compromís ètic.

1955:T13 - Aprendre de manera autònoma.

1955:T13.00 - Aprendre de manera autònoma.

1955:T14 - Adaptar-se a noves situacions.

1955:T14.00 - Adaptar-se a noves situacions.

1955:T15 - Proposar idees i solucions creatives.

1955:T15.00 - Proposar idees i solucions creatives.

1955:T17 - Demostrar iniciativa i esperit emprenedor.

1955:T17.00 - Demostrar iniciativa i esperit emprenedor.

1955:T18 - Demostrar motivació per la qualitat.

1955:T18.00 - Demostrar motivació per la qualitat.

1955:T19 - Mostrar sensibilitat en qüestions mediambientals.

1955:T19.00 - Mostrar sensibilitat en qüestions mediambientals.

Continguts

1. Bases moleculars de la termodinàmica

- Entropia estadística, Microestats i Col·lectius.
- Distribució de Boltzmann.
- Funció de partició del sistema macroscòpic.
- Energia mitjana i pressió mitjana.
- Sistemes de partícules independents: funció de partició molecular.

2. Lleis de la termodinàmica

- Introducció conceptual de les quatre lleis.
- Definicions bàsiques.
- Processos exotèrmics i endotèrmics.
- Energia interna, calor, treball i primer principi.
- Tipus de treballs.
- Treball d'expansió: expansió isotèrmica reversible i expansió irreversible.
- Capacitats calorífiques a volum i pressió constants.
- Dependència de la capacitat calorífica amb T.
- Entalpia.
- Processos espontanis, entropia i segon principi.
- Desigualtat de Clausius.
- Dependència de l'entropia amb T.
- Energia lliure de Gibbs i energia lliure de Helmholtz.
- Treball màxim.
- Dependència de G amb temperatura i pressió.
- Relacions entre magnituds termodinàmiques macroscòpiques i propietats moleculars.
- Interpretació molecular de les lleis de la termodinàmica. Aplicació a gasos ideals.

3. A. Sistemes fisicoquímics de composició variable. Potencial químic d'una substància. Variables termodinàmiques d'una reacció química

- Composició d'un sistema fisicoquímic.
- Definició de magnitud molar parcial X_j . Relació entre X i X_j .
- Relació de Gibbs-Duhem.

- Potencial químic. Relació entre G i μ
- Expressions de μ .
- Potencial químic estàndard. Estats estàndard.
- Mescla de gasos ideals.
- Funcions termodinàmiques i funcions termodinàmiques estàndard per a una reacció química.
- Energia interna, entalpia, entropia i funció de Gibbs per a una reacció química, μ_r^X .
- Energia interna, entalpia, entropia i funció de Gibbs per a una reacció química en el seu estat estàndard, $\mu_r^{X^0}$.
- Llei de Hess.
- Dependència de μ_r^X amb la temperatura, llei de Kirchhoff.
- Determinació de calors de reacció.

B. Evolució i equilibri en sistemes fisicoquímics de composició variable

- Evolució i equilibri. Evolució d'una reacció química i μ_r^G .
- $\mu_r^{G^0}$ i constant d'equilibri K^0 .
- Relació entre μ_r^G i $\mu_r^{G^0}$.
- Dependència de la constant d'equilibri amb la temperatura.
- Desplaçament de l'equilibri químic. Principi de Le Chatelier.

C. Interpretació molecular de l'equilibri químic

- Termoquímica molecular.
- Termodinàmica Estadística i l'equilibri químic: energia de Gibbs de reacció i constant d'equilibri.
- Aplicació a gasos ideals.

4. A. Energia de Gibbs i Equilibri de Fases

- Criteri d'Equilibri i Espontaneïtat.
- Regla de les Fases.
- Diagrama de Fases d'un Component.
- Equacions de Clapeyron y Clausius- Clapeyron

B. Dissolucions no electrolítiques: Sistemes de més d'un Component

- Unitats de Concentració.
- Volum molar parcial.
- Entalpia, Entropia i Energia molar parcial de Gibbs.

- Termodinàmica de les Dissolucions.
- Dissolucions ideals de líquids volàtils:
 1. Llei de Raoult.
 2. Dissolucions diluïdes líquid-líquid i gas-líquid (Llei de Henry).
- Dissolucions Reals.
- Equilibri de Fases de Sistemes de dos Components.
 1. Equilibri L-V per dissolucions L-L volàtils.
 - a) Construcció del diagrama pressió -composició.
 - b) Regla de la Palanca.
 - c) Construcció del diagrama temperatura-composició.
 - d) Destil·lació.
 - e) Dissolucions no ideals: Azeòtrop.
 2. Equilibri L-L.
 - a) Totalment miscibles.
 - b) Parcialment miscibles.
 3. Equilibri S-L.
 - a) Líquid totalment miscible/Sòlid immiscible amb formació d'un nou compost.
 - b) Líquid parcialment miscible/Sòlid immiscible.
 - c) Líquid totalment miscible/Sòlid totalment miscible.
 - d) Líquid totalment miscible/Sòlid parcialment miscible.
 - e) Immiscibilitat Total
- Propietats Col·ligatives.
 1. Disminució de la pressió de vapor.
 2. Augment del punt d'ebullició .
 3. Descens del punt de congelació.
 4. Pressió Osmòtica.

Metodologia

Activitats Dirigides

Classes Teòriques

Classes de Problemes

Pràctiques d'aula o laboratori

Activitats Supervisades

Tutories

Activitats Autònomes

Estudi, Resolució de Problemes, Redacció de Treballs, Lectures i Obtenció d'informació

Preparació de les pràctiques, lectures, redacció d'informes i cerca bibliogràfica

Activitats formatives

Activitat	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Tipus: Dirigides			
Classes Teòriques	27	1.08	1955:E01.31 , 1955:E01.32 , 1955:E01.33 , 1955:E02.21 , 1955:E02.23 , 1955:E02.25 , 1955:E06.06 , 1955:E09.03 , 1955:E09.05 , 1955:T11.00 , 1955:T05.00 , 1955:T04.00 , 1955:T01.00 , 1955:E09.04 , 1955:E06.07 , 1955:E03.08 , 1955:E02.24 , 1955:E02.22 , 1955:E02.20
Classes de Problemes	11	0.44	1955:E01.31 , 1955:E01.32 , 1955:E01.33 , 1955:E02.21 , 1955:E02.23 , 1955:T01.00 , 1955:E09.05 , 1955:E09.04 , 1955:E09.03 , 1955:E06.07 , 1955:E06.06 , 1955:E03.08 , 1955:E02.25 , 1955:E02.24 , 1955:T19.00 , 1955:T18.00 , 1955:T15.00 , 1955:T13.00 , 1955:T12.00 , 1955:T11.00 , 1955:T10.00 , 1955:T07.00 , 1955:T05.00 , 1955:T04.00 , 1955:T03.00 , 1955:T02.00 , 1955:E02.22 , 1955:E02.20
Pràctiques de Laboratori	24	0.96	1955:E01.31 , 1955:E01.32 , 1955:E01.33 , 1955:E02.21 , 1955:E02.23 , 1955:T12.00 , 1955:T11.00 , 1955:T10.00 , 1955:T07.00 , 1955:T06.00 , 1955:T05.00 , 1955:T04.00 , 1955:T03.00 , 1955:T02.00 , 1955:T19.00 , 1955:T18.00 , 1955:T15.00 , 1955:T13.00 , 1955:T01.00 , 1955:E09.04 , 1955:E09.03 , 1955:E06.07 , 1955:E06.06 , 1955:E03.08 , 1955:E02.25 , 1955:E02.24 , 1955:E02.22 , 1955:E02.20
Tipus: Supervisades			
Tutories	2	0.08	1955:E01.31 , 1955:T15.00 , 1955:T11.00 , 1955:T10.00 , 1955:T05.00 , 1955:T02.00 , 1955:E06.07 , 1955:E06.06 , 1955:E03.08 , 1955:E02.25 , 1955:E02.24 , 1955:E01.33 , 1955:E02.20 , 1955:E02.21 , 1955:E02.23 , 1955:E02.22 , 1955:E01.32
Tipus: Autònomes			
Estudi, Resolució de Problemes, Redacció de Treballs, Lectures i Obtenció d'informació	60	2.4	1955:E01.31 , 1955:E02.21 , 1955:E02.23 , 1955:E02.25 , 1955:E06.06 , 1955:T19.00 , 1955:T18.00 , 1955:T15.00 , 1955:T13.00 , 1955:T11.00 , 1955:T10.00 , 1955:T07.00 , 1955:T06.00 , 1955:T05.00 , 1955:T04.00 , 1955:T03.00 , 1955:T02.00 , 1955:T01.00 , 1955:E09.05 , 1955:E09.04 , 1955:E09.03 , 1955:E06.07 , 1955:E03.08 , 1955:E02.24 , 1955:E02.22 , 1955:E02.20 , 1955:E01.32 , 1955:E01.33
Preparació de pràctiques, Lectures, Redacció d'informes i	3	0.12	1955:E01.31 , 1955:T11.00 , 1955:T10.00 , 1955:T07.00 , 1955:T06.00 , 1955:T05.00 , 1955:T04.00 , 1955:T03.00 , 1955:T02.00 , 1955:T01.00 , 1955:T19.00 , 1955:T18.00 , 1955:T17.00 , 1955:T13.00 , 1955:T12.00 ,

Cerca bibliogràfica	1955:E09.05 , 1955:E09.04 , 1955:E09.03 , 1955:E06.07 , 1955:E06.06 , 1955:E03.08 , 1955:E02.25 , 1955:E02.24 , 1955:E01.33 , 1955:E02.20 , 1955:E02.21 , 1955:E02.23 , 1955:E02.22 , 1955:E01.32
---------------------	---

Avaluació

Examen parcial 1

Examen parcial 2

Examen de Recuperació

2 Treballs Individuals

2 Treballs en Grup

Pràctiques de Laboratori Informes / Qüestionaris

Activitats d'avaluació

Activitat	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
2 Treballs Individuals	3.75 + 3.75 %	4	0.16	1955:E01.31 , 1955:E01.32 , 1955:E02.20 , 1955:E01.33 , 1955:E02.23 , 1955:E02.25 , 1955:E06.06 , 1955:E09.03 , 1955:E09.05 , 1955:T13.00 , 1955:T11.00 , 1955:T07.00 , 1955:T06.00 , 1955:T05.00 , 1955:T04.00 , 1955:T03.00 , 1955:T02.00 , 1955:T01.00 , 1955:T19.00 , 1955:T18.00 , 1955:T17.00 , 1955:T15.00 , 1955:E09.04 , 1955:E06.07 , 1955:E03.08 , 1955:E02.24 , 1955:E02.22 , 1955:E02.21
2 Treballs en Grup	3.75 + 3.75 %	6	0.24	1955:E01.31 , 1955:E01.32 , 1955:E02.20 , 1955:E01.33 , 1955:E02.23 , 1955:E02.25 , 1955:E06.06 , 1955:E09.03 , 1955:E09.05 , 1955:T13.00 , 1955:T11.00 , 1955:T07.00 , 1955:T06.00 , 1955:T05.00 , 1955:T04.00 , 1955:T03.00 , 1955:T02.00 , 1955:T01.00 , 1955:T19.00 , 1955:T18.00 , 1955:T17.00 , 1955:T15.00 , 1955:E09.04 , 1955:E06.07 , 1955:E03.08 , 1955:E02.24 , 1955:E02.22 , 1955:E02.21
Examen Parcial 1	20 %	2	0.08	1955:E01.31 , 1955:E01.32 , 1955:E01.33 , 1955:E02.22 , 1955:E02.25 , 1955:T01.00 , 1955:T05.00 , 1955:T12.00 , 1955:T13.00 , 1955:T11.00 , 1955:T03.00 , 1955:E03.08 , 1955:E02.23 , 1955:E02.20
Examen Parcial 2	45 %	2	0.08	1955:E01.31 , 1955:E02.25 , 1955:T13.00 , 1955:T12.00 , 1955:T11.00 , 1955:T05.00 , 1955:T03.00 , 1955:T01.00 , 1955:E06.07 , 1955:E06.06 , 1955:E03.08 , 1955:E02.24 , 1955:E01.33 , 1955:E02.21 , 1955:E02.22 , 1955:E02.23 , 1955:E02.20 , 1955:E01.32
Examen de Recuperació	70 %	3	0.12	1955:E01.31 , 1955:E01.32 , 1955:E01.33 , 1955:E02.23 , 1955:E02.25 , 1955:E06.06 , 1955:E09.03 , 1955:T01.00 , 1955:T13.00 , 1955:T12.00 , 1955:T11.00 , 1955:T10.00 , 1955:T07.00 , 1955:T05.00 , 1955:T03.00 , 1955:T02.00 , 1955:E09.04 , 1955:E06.07 , 1955:E03.08 , 1955:E02.24 , 1955:E02.22 , 1955:E02.21 , 1955:E02.20
Pràctiques de Laboratori (Informes / Qüestionaris)	20 %	6	0.24	1955:E01.31 , 1955:E01.32 , 1955:E02.20 , 1955:E02.22 , 1955:E02.24 , 1955:E03.08 , 1955:E06.07 , 1955:E09.04 , 1955:T19.00 , 1955:T18.00 , 1955:T17.00 , 1955:T14.00 , 1955:T13.00 , 1955:T12.00 , 1955:T11.00 , 1955:T10.00 , 1955:T07.00 , 1955:T06.00 , 1955:T05.00 , 1955:T04.00 , 1955:T03.00 , 1955:T02.00 , 1955:T01.00 , 1955:E09.05 , 1955:E09.03 , 1955:E06.06 , 1955:E02.25 , 1955:E02.23 , 1955:E02.21 , 1955:E01.33

Bibliografia

- Thermodynamics and Statistical Mechanics, John M. Seddon and Julian D. Gale, Royal Society of Chemistry, 2002.
- Fisicoquímica, Raymond Chang, McGraw Hill, 2008 (Tercera Ed.).
- Química Física, Atkins, de Paula, Editorial Medica Panamericana, 2008 (Octava Ed.)