

GUIA DOCENT
Termodinàmica i Cinètica
GRAU DE BIOQUÍMICA

UAB
Universitat Autònoma
de Barcelona

Guia docent
Titulacions de Grau i de Màster





1. Dades de l'assignatura

| | |
|--------------------------------------|---|
| Nom de l'assignatura | Termodinàmica i Cinètica |
| Codi | 100888 |
| Crèdits ECTS | 6 |
| Curs i període en el que s'imparteix | 1r curs/ 1r semestre |
| Horari | http://www.uab.cat/biociencias/ |
| Lloc on s'imparteix | <i>Facultat de Ciències i Biociències. Aula C3/019</i> |
| Llengües | Català i castellà |

Professor/a de contacte

| | |
|------------------------|--|
| Nom professor/a | Mireia Garcia Viloca |
| Departament | Química |
| Universitat/Institució | UAB |
| Despatx | C7-145 |
| Telèfon | 93 581 4220 |
| e-mail | mireia@klignon.uab.cat |
| Horari d'atenció | A convenir |

2. Equip docent

| | |
|------------------------|--|
| Nom professor/a | |
| Departament | |
| Universitat/Institució | |
| Despatx | |
| Telèfon | |
| e-mail | |
| Horari de tutories | |

(Afegiu tants camps com sigui necessari)



3.- Prerequisits

Tot i que no hi ha pre-requisits oficials, és convenient que l'alumne repassi el càlcul de derivades i integrals.

4.- Contextualització i objectius formatius de l'assignatura

L'objectiu general de l'assignatura és posar en contacte l'estudiant, per primera vegada, amb la Química Física. A la llarga, es pretén que l'estudiant prengui consciència de la importància de la Química Física com a base teòrica de la Química i es familiaritzi amb la seva metodologia teòrica i experimental. L'objectiu més general del programa teòric és ajudar a l'estudiant a comprendre el fenòmens químics i bioquímics del món macroscòpic. S'estudiaran doncs, els conceptes bàsics de Termodinàmica i Cinètica Química. Alhora, també es pretén que l'estudiant sigui conscient del doble caràcter, teòric-experimental, de la Química Física. Un altre objectiu general és donar a l'estudiant una visió interdisciplinari de la Química, en concret, la seva estreta relació amb la Física, les Matemàtiques i la Biologia.

Objectius específics:

- 1) Conèixer les lleis de la Termodinàmica Clàssica i ser capaç d'aplicar-les a l'estudi de sistemes químics i biològics.
- 2) Conèixer els fonaments de la Cinètica química i ser capaç d'aplicar-los en l'estudi de reaccions químiques i bioquímiques.
- 3) Distingir entre fenòmens governats per la Termodinàmica i fenòmens governats per la Cinètica.



5.- Competències i resultats d'aprenentatge de l'assignatura

Competència

CE1. Utilitzar els fonaments de matemàtiques, física i química necessaris per comprendre, desenvolupar i avaluar els processos químics de la matèria viva.

Resultats d'aprenentatge

CE1.01. Aplicar els principis de la Termodinàmica i la Cinètica als processos bioquímics.
CE1.02. Descriure les lleis que regeixen l'equilibri químic de les diverses reaccions bioquímiques.

Competència

CT2. Interpretar resultats experimentals i identificar elements consistents i inconsistents.

Competència

CT6. Gestionar la informació, organització i planificació del treball.

Competència

CT9. Col·laborar amb altres companys de treball.



6.- Continguts de l'assignatura

Conceptes Fonamentals de Cinètica Química. Aspectes termodinàmics i cinètics d'una reacció química. Reacció elemental o complexa. Definició de velocitat de reacció. Equació de velocitat. Equacions integrades de velocitat. Període de semireacció. Efecte de la temperatura sobre les velocitats de reacció.

Mecanisme de reacció. Mecanismes de primer ordre: reaccions reversibles, consecutives i competitives. Mètodes aproximats: aproximacions de l'estat estacionari i de l'equilibri. Reaccions en cadena.

Catàlisi. Mecanisme general de la catàlisi química. Tipus de catàlisi . Catàlisi enzimàtica.

Introducció a la Termodinàmica. Sistemes termodinàmics. Propietats termodinàmiques. Equilibri termodinàmic. Gasos ideals. Gasos reals.

Primer Principi de la Termodinàmica. Energia, calor i treball. Primer principi de la Termodinàmica. Capacitats calorífiques. Entalpia. Aplicació a gasos ideals.

Segon Principi de la Termodinàmica. Espontaneïtat. Segon principi de la termodinàmica. Definició macroscòpica d'entropia. Càlculs d'entropia: exemples.

Críteris d'Espontaneïtat i Equilibri. Equilibri material. Desigualtat de Clausius. Equació fonamental de la Termodinàmica. Variables naturals. Energia lliure de Helmholtz. Energia lliure de Gibbs. Críteris d'espontaneïtat i equilibri. Aplicacions.

Funcions Termodinàmiques de Reacció. Termoquímica. Calor de reacció. Estat estàndard i estat de referència. Entalpia de reacció i de formació estàndard. Lleis de la Termoquímica. Dependència de l'entalpia de reacció amb la temperatura: Llei de Kirchoff. Tercer principi de la Termodinàmica. Entalpia i energia lliure de reacció.

Equilibri material. Sistemes de composició variable: potencial químic. Mescles homogènies. Mescles de gasos ideals. Dissolucions líquides ideals. Dissolucions líquides diluïdes. Propietats col·ligatives. Condició d'equilibri d'una reacció química. Equilibri químic en mescles de gasos ideals. Constant termodinàmica d'equilibri. Dependència de la constant d'equilibri amb la temperatura. Desplaçament de l'equilibri.



7.- Metodologia docent i activitats formatives

Els alumnes aprendran treballant. Hauran d'aprendre a cercar coneixement i a construir-ne, a treballar en equip, a afrontar i resoldre problemes i a trobar estratègies d'actuació.

Classes de teoria: es duran a terme complementant els avantatges que proporciona la utilització de presentacions amb els que s'obtenen de la realització de desenvolupaments a la pissarra. Es tractarà d'impulsar la participació dels estudiants durant les classes. El professor resoldrà alguns casos pràctics per tal d'exemplificar la teoria.

Classes de problemes: són essencials per a la correcta comprensió de l'assignatura i per a l'aplicació dels conceptes estudiats a la resolució de problemes reals. L'alumne disposarà d'una col·lecció de problemes que s'aniran resolent al llarg del curs. Quan el professor ho determini, serà obligatòria l'entrega de problemes resolts i l'exposició oral dels mateixos a classe per part de l'alumne.

| TIPUS D'ACTIVITAT | ACTIVITAT | HORES | RESULTATS D'APRENTATGE |
|-------------------|-----------|-------|------------------------|
|-------------------|-----------|-------|------------------------|

Dirigides

| | | |
|----------------------|----|-------------------------------|
| Classes de teoria | 41 | CE1.01, CE1.02 |
| Classes de problemes | 7 | CE1.01, CE1.02, CT2, CT6, CT9 |

Supervisades

| | | |
|------------------|---|---------------------|
| Tutories en grup | 6 | CE1.01, CE1.02, CT9 |
|------------------|---|---------------------|

Autònomes

| | | |
|---------------------------------|----|---------------------|
| Estudi i resolució de problemes | 96 | CE1.01, CE1.02, CT6 |
|---------------------------------|----|---------------------|



8.- Avaluació

L'avaluació es realitzarà al llarg de tot el curs, en grup i individualment:

1. Avaluació en grup: s'avalua el treball realitzat en grup i l'assoliment de les competències CT6 i CT9. El treball en grup consistirà en la resolució i exposició de problemes que el professor indicarà quan cregui convenient. La qualificació obtinguda en aquesta avaluació en grup representa el 35 % de la nota final (individual) de l'assignatura.

2. Avaluació individual: en aquesta part s'avalua individualment els coneixements científico-tècnics de la matèria assolits per l'alumne, així com la seva capacitat d'anàlisi i síntesi, i de raonament crític. L'avaluació individual tindrà un pes del 65% en la nota final (individual) de l'assignatura i consistirà en:

Prova parcial escrita: la matèria avaluada serà només de Cinètica. L'alumne que passi la prova parcial no caldrà que es presenti a la primera part de la prova final.

Prova final escrita: la prova final constarà de dues parts: Primera part: Cinètica. Segona part: Termodinàmica i equilibri. No hi ha una nota mínima de la segona part per aprovar la prova final. Aquells alumnes que, havent aprovat la prova parcial de cinètica, només entreguin la segona part, se'ls comptarà la nota de la prova parcial com a nota de la primera part. Aquells alumnes que entreguin la primera part, tot i haver aprovat la prova parcial, se'ls comptarà la nota de la primera part i NO la del parcial.

La prova parcial de cinètica (o la primera part) té un pes de 1/3 i la segona part de 2/3 en l'avaluació individual.

Els no-presentats

Es considera que un alumne s'ha presentat per a ser avaluat quan participi en l'avaluació en grup en un mínim de dues ocasions o bé es presenti a la prova parcial.

ACTIVITATS D'AVALUACIÓ

HORES

RESULTATS D'APRENTATGE

| | | |
|---|----|-------------------------------|
| Lliuraments de problemes resolts (avaluació en grup) | -- | CE1.01, CE1.02, CT2, CT6, CT9 |
| Exposició oral de problemes resolts (avaluació en grup) | 7 | CE1.01, CE1.02, CT2, CT6, CT9 |
| Prova parcial (avaluació individual) | 1 | CE1.01, CE1.02, CT2 |
| Prova final (avaluació individual) | 3 | CE1.01, CE1.02, CT2 |



9- Bibliografia i enllaços web

Bibliografia bàsica:

- 1) I. N. Levine, *Physical Chemistry*, 5th Edition, McGraw Hill, 2002. (Edició traduïda: *Fisicoquímica*, 2 volums, McGraw Hill, 2003)
- 2) P. W. Atkins, J. de Paula, *Atkins' Physical Chemistry*, 8th Edition, Oxford University Press, 2006. (Edició traduïda: *Química Física*, 6a Ed, Omega, 1999)
- 3) P.W. Atkins, J. de Paula, *Elements of Physical Chemistry*, 4a ed. Oxford University Press, Oxford, 2005.
- 4) S.R. Logan, *Fundamentos de Cinética Química*, Addison Wesley iberoamericana, 2000.

Enllaços web:

Espai virtual de l'assignatura: <http://cv2008.uab.cat>



10.- Programació de l'assignatura

ACTIVITATS D'APRENTATGE

| DATA/ES | ACTIVITAT | LLOC | MATERIAL | RESULTATS D'APRENTATGE |
|---|----------------------|----------------|--|-------------------------------|
| (consultar horaris) | Classes de teoria | C3/019 | (consultar material docent: aula virtual) | CE1.01, CE1.02, CT2. |
| Tutoria 1--- setmana 2 DII GA, Dm GB de 14 a 15. Tutoria 2.--- setmana 7 DII GA, Dm GB de 14 a 15. Tutoria 3--- setmana 9 DII GA, dm GB de 14 a 15. Tutoria 4--- setmana 12 Dc GA, dj GB de 14 a 15. Tutoria 5--- setmana 14 Dc GA, Dj GB de 14 a 15. Tutoria 6 --- setmana 17 DII de 10 a 11 el GA i de 11 a 12 el GB. | Tutories | C3/019 | (consultar material docent: aula virtual) | CE1.01, CE1.02, CT2, CT6, CT9 |
| Cada 15 dies a partir de la 3a setmana | Classes de problemes | C3/019 | (consultar material docent: aula virtual) | CE1.01, CE1.02, CT2, CT6, CT9 |
| Setmana 7 (30 | Prova parcial | Consultar aula | | CE1.01, CE1.02, CT2, CT6. |



| | | | | |
|-------------------------------|-------------|-----------|--|---------------------------|
| d'octubre 2009) | | virtual | | |
| Setmana 19 (3 de febrer 2010) | Prova final | Consultar | | CE1.01, CE1.02, CT2, CT6. |

LLIURAMENTS

| DATA/ES | LLIURAMENT | LLOC | MATERIAL | RESULTATS D'APRENTATGE |
|---|---------------------------|--------|---|-------------------------------|
| Cada 15 dies a partir del 5 d'octubre de 2009 | Problemes resolts en grup | C3/019 | (consultar material docent: aula virtual) | CE1.01, CE1.02, CT2, CT6, CT9 |