

Termodinàmica i cinètica

2012/2013

Codi: 100888

Crèdits ECTS: 6

Titulació	Pla	Tipus	Curs	Semestre
2500252 Graduat en Bioquímica	814 Graduat en Bioquímica	FB	1	2

Professor de contacte

Nom: Mireia García Viloca

Correu electrònic: Mireia.Garcia@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

Tot i que no hi ha pre-requisits oficials, és convenient que l'alumne repassi el càlcul de derivades i integrals i els conceptes inclosos en la Química de Batxillerat.

Objectius

L'objectiu general de l'assignatura és posar en contacte l'estudiant, per primera vegada, amb l'estudi teòric dels fenòmens químics i bioquímics, és a dir, amb les aportacions de la Química Física a una ciència de la vida com la Bioquímica. A la llarga, es vol que l'estudiant prengui consciència de la importància de la Química Física com a base teòrica de la Bioquímica, i es familiaritzi amb la seva metodologia teòrica i experimental. L'objectiu més general del programa teòric és ajudar a l'estudiant a comprendre els fenòmens químics i bioquímics del món macroscòpic. S'estudiaran doncs, els conceptes bàsics de Termodinàmica i Cinètica Química. Alhora, també es vol 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 interdisciplinària de la Bioquímica, en concret, la seva estreta relació amb la Química, la Física, i les Matemàtiques.

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.

Competències

- Col·laborar amb altres companys de treball.
- Gestionar la informació, organització i planificació del treball.
- Identificar l'estructura molecular i explicar la reactivitat de les diferents biomolècules: carbohidrats, lípids, proteïnes i àcids nucleics.
- Interpretar resultats experimentals i identificar elements consistents i inconsistents.
- Tenir capacitat d'autoavaluació.
- Tenir iniciativa i esperit emprenedor.
- Utilitzar els fonaments de matemàtiques, física i química necessaris per comprendre, desenvolupar i avaluar els processos químics de la matèria viva.

Resultats d'aprenentatge

1. Aplicar els principis de la termodinàmica i la cinètica als processos bioquímics.
2. Col·laborar amb altres companys de treball.
3. Descriure els mecanismes de reacció que operen en els principals processos bioquímics.
4. Descriure les lleis que regeixen l'equilibri químic de les diverses reaccions bioquímiques.
5. Gestionar la informació, organització i planificació del treball.
6. Interpretar resultats experimentals i identificar elements consistents i inconsistents.
7. Tenir capacitat d'autoavaluació.
8. Tenir iniciativa i esperit emprenedor.

Continguts

Bloc 1: Fonaments de Termodinàmica

Energia. Sistemes termodinàmics. Lleis de la Termodinàmica.

Formes de transferència de l'energia: calor i treball. Energia interna i entalpia. Capacitat calorífica a volum constant i a pressió constant. Processos reversibles i irreversibles. Sistemes exemple: gas ideal, reaccions químiques i bioquímiques (Termoquímica)

Distribució de l'energia i espontaneïtat dels processos. Entropia. Interpretació microscòpica. Criteris d'espontaneïtat i equilibri en un sistema de composició fixa. Energia lliure de Gibbs i de Helmholtz. Energia lliure de reacció estàndard.

Bloc 2: Equilibri material

Processos de canvi de fase. Condició d'equilibri de fases. Equació de Clapeyron i de Clausius-Clapeyron. Diagrama de fases. Regla de les fases.

Dissolucions. Propietats molars parcials. Cas concret: potencial químic. Termodinàmica de mescles. Mesclures binàries de líquids volàtils. Llei de Raoult. Llei de Henry. Propietats colligatives.

Equilibri químic. Constant termodinàmica d'equilibri. Desplaçament de l'equilibri.

Bloc 3: Cinètica

Fonaments de Cinètica Química. Aspectes cinètics d'una reacció química. Reacció elemental o complexa. Definició de velocitat de reacció. Equació de velocitat. Determinació de l'ordre i de la constant de velocitat. Efecte de la temperatura sobre la constant de velocitat.

Mecanismes de reacció. Mecanismes de primer ordre: reaccions reversibles, consecutives i competitives. Aproximacions de l'estat estacionari i de l'equilibri. Catàlisi enzimàtica. Mecanisme general de catàlisi química. Catàlisi enzimàtica. Equació de Michaelis-Menten.

Metodologia

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 duren a terme mitjançant 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.

Activitats formatives

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Tipus: Dirigides			
Classes de problemes	7	0,28	1, 4, 6
Classes de teoria	41	1,64	1, 3, 4, 6
Tipus: Supervisades			
Treball en grup	8	0,32	1, 2, 5, 6
Tipus: Autònomes			
Estudi i resolució de problemes	88	3,52	1, 3, 4, 5, 6

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 de problemes i qüestions que el professor indicarà quan cregui convenient. La qualificació obtinguda en aquesta avaluació en grup representa el 20 % 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 80% en la nota final (individual) de l'assignatura i consistirà en:

Proves parcials escrites: L'alumne que passi les dues proves parcials (amb una nota mínima de 5 punts sobre 10) no caldrà que es presenti a la prova final.

Prova final escrita

Els no-presentats

Es considerarà que un estudiant obtindrà la qualificació de No Presentat si el número d'activitats d'avaluació realitzades és inferior al 50% de les programades per a l'assignatura.

Activitats d'avaluació

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Avaluació en grup	20%	0	0	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8
Prova final	80%	3	0,12	1, 3, 4
Proves parcials	80%	3	0,12	1, 3, 4, 6

Bibliografia

Bibliografia bàsica:

- 1) J. M. Seddon AND J. D. Gale, Thermodynamics and Statistical Mechanics, Royal Society of Chemistry, 2001.
- 2) P.W. Atkins, J. de Paula, Physical Chemistry for the Life Sciences, Oxford University Press, 2006.
- 3) Chang, R., Physical Chemistry for chemical and biological sciences, University Science Books, 2000. (Edició traduïda: Fisicoquímica, MacGraw-Hill, 2008)

Bibliografia complementària:

- 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.
- 5) Crowe and Bradshaw, Chemistry for the Biosciences, 2nd edition, Oxford University Press, 2010.