

Termodinàmica Química

2012/2013

Codi: 102502

Crèdits ECTS: 6

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

Professor de contacte

Nom: Gonzalo Guirado López

Correu electrònic: 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

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 complementarietat 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

- Adaptar-se a noves situacions.
- Aplicar els coneixements químics a la resolució de problemes de naturalesa quantitativa o qualitativa en àmbits familiars i professionals.
- Aprendre de manera autònoma.
- Comunicar-se oralment i per escrit en la llengua pròpia.
- Demostrar iniciativa i esperit emprenedor.
- Demostrar motivació per la qualitat.
- Demostrar que es comprenen els conceptes, els principis, les teories i els fets fonamentals de les diferents àrees de la química.
- Emprar correctament la llengua anglesa en l'àmbit de la química.
- Gestionar l'organització i la planificació de tasques.
- Gestionar, analitzar i sintetitzar informació.
- 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.

- Mantenir un compromís ètic.
- Mostrar sensibilitat en qüestions mediambientals.
- Obtenir informació, incloent-hi la utilització de mitjans telemàtics.
- Operar amb un cert grau d'autonomia i integrar-se en poc temps en l'ambient de treball.
- Proposar idees i solucions creatives.
- Raonar de forma crítica.
- Reconèixer i analitzar problemes químics i plantejar respostes o treballs adequats per a resoldre'ls.
- Resoldre problemes i prendre decisions.
- Tenir destresa per al càlcul numèric.
- Utilitzar la informàtica per al tractament i presentació d'informació.

Resultats d'aprenentatge

1. Adaptar-se a noves situacions.
2. Analitzar i resoldre problemes d'índole termodinàmica.
3. Aplicar els aspectes teòrics dels equilibris de fases per entendre els processos de destil·lacions.
4. Aplicar els models esmentats amb finalitats predictives sabent-ne valorar les limitacions.
5. Aprendre de manera autònoma.
6. Comunicar-se oralment i per escrit en la llengua pròpia.
7. Definir amb bases entròpiques l'espontaneïtat d'un procés.
8. Demostrar iniciativa i esperit emprenedor.
9. Demostrar motivació per la qualitat.
10. Entendre com la presència de solut afecta les propietats de les dissolucions.
11. Enumerar i descriure les bases de la termodinàmica estadística.
12. Explicar els principis de termodinàmica clàssica i les seves aplicacions en química.
13. Gestionar l'organització i la planificació de tasques.
14. Gestionar, analitzar i sintetitzar informació.
15. Identificar les denominacions angleses de les variables fisicoquímiques fonamentals.
16. Interpretar els comportaments moleculars i els fenòmens d'equilibri en gasos ideals.
17. Mantenir un compromís ètic.
18. Mostrar sensibilitat en qüestions mediambientals.
19. Obtenir informació, incloent-hi la utilització de mitjans telemàtics.
20. Operar amb un cert grau d'autonomia i integrar-se en poc temps en l'ambient de treball.
21. Proposar idees i solucions creatives.
22. Raonar de forma crítica.
23. Reconèixer en processos naturals o industrials els fenòmens d'intercanvis d'energia i les lleis que els governen.
24. Relacionar propietats macroscòpiques i propietats d'àtoms i molècules individuals.
25. Relacionar un model teòric amb els fenòmens d'equilibris químics.
26. Resoldre problemes i prendre decisions.
27. Resumir un text científic relacionat amb l'assignatura, en llengua anglesa
28. Tenir destresa per al càlcul numèric.
29. Utilitzar els conceptes i les formulacions dels potencials químics i electroquímics en processos reals.
30. Utilitzar la informàtica per al tractament i presentació d'informació.
31. Utilitzar les denominacions angleses dels diferents estats de la matèria i dels seus canvis.

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_i .
- 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, ${}_rX$.
- Energia interna, entalpia, entropia i funció de Gibbs per a una reacció química en el seu estat estàndard, ${}_rX^0$.

- Llei de Hess.
- Dependència de μ_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_G .
- μ_G^0 i constant d'equilibri K^0 .
- Relació entre μ_G i μ_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

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Tipus: Dirigides			
Classes Teòriques	27	1,08	3, 4, 6, 7, 10, 11, 12, 14, 15, 16, 19, 22, 23, 24, 25, 27, 29, 31
Classes de Problemes	11	0,44	3, 4, 5, 6, 7, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 31
Pràctiques de Laboratori	24	0,96	3, 4, 5, 6, 7, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 28, 29, 30, 31
Tipus: Supervisades			
Tutories	2	0,08	3, 4, 7, 10, 11, 12, 13, 14, 16, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 29
Tipus: Autònomes			
Estudi, Resolució de Problemes, Redacció de Treballs, Lectures i Obtenció d'informació	60	2,4	3, 4, 5, 6, 7, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31
Preparació de pràctiques, Lectures, Redacció d'informes i Cerca bibliogràfica	3	0,12	3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31

Avaluació

Examen parcial 1

Examen parcial 2

Examen de Recuperació

1 Treballs Individuals

1 Treballs en Grup

Pràctiques de Laboratori Informes / Qüestionaris

Activitats d'avaluació

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
1 Treballs Individuals	5 %	4	0,16	2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 18, 19, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31
1 Treballs en Grup	5 %	6	0,24	2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 18, 19, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31
Examen Parcial 1	30 %	2	0,08	4, 5, 6, 7, 11, 12, 14, 16, 17, 22, 23, 24, 26
Examen Parcial 2	40 %	2	0,08	3, 4, 5, 6, 7, 10, 11, 12, 14, 16, 17, 22, 23, 24, 25, 26, 29
Examen de Recuperació	70 %	3	0,12	3, 4, 5, 6, 7, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 20, 22, 23, 24, 25, 26, 28, 29, 31

Pràctiques de Laboratori (Informes / Qüestionaris)	20 %	6	0,24	1, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31
---	---------	---	------	---

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.)
- Química Molecular Estadística, Editorial Síntesis, 2008
- FisicoQuímica, Ira N. Levine, Editorial McGraw Hill, 2004