

Termodinàmica Química

2013/2014

Codi: 102502

Crèdits: 6

Titulació	Tipus	Curs	Semestre
2502444 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

Química

- 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 la 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

2. Lleis de la termodinàmica

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

B. Evolució i equilibri en sistemes fisicoquímics de composició variable

C. Interpretació molecular de l'equilibri químic

4. A. Energia de Gibbs i Equilibri de Fases

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

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

L'avaluació dels estudiants es realitzarà mitjançant diverses evidències escrites:

- **Exàmens escrits:** Es realitzaran dos exàmens parcials al llarg del curs, un a mitjans i l'altre a final del semestre. Cadascun d'aquests exàmens tindrà un pes del 35% sobre la nota final. Si la nota promig d'aquests dos exàmens és menor de 5, s'haurà de realitzar un examen final a l'acabar el semestre que inclourà els continguts de tot el curs, i la nota del qual equivaldrà al 70% del total (i substituirà a la dels exàmens parcials). Els estudiants que vulguin millorar la seva nota també podran presentar-se a l'examen final; si la nota d'aquest examen és superior al promig dels dos exàmens parcials, llavors la nota de l'examen final equivaldrà al 70% del final. En cas contrari, la nota d'exàmens correspondrà al promig de la nota dels exàmens parcials i la nota de l'examen final.
- **Pràctiques de laboratori:** Les pràctiques de laboratori s'avaluaran mitjançant la correcció d'informe-qüestionari de laboratori. La nota promig obtinguda de les pràctiques al laboratori equivaldrà al 10 % de la nota final de l'assignatura.
- **Treball Individual:** Els estudiants hauran d'entregar com a mínim 4 dels 6 exercicis que seran seleccionats pels professors de la col·lecció de problemes dins dels terminis establerts. La nota atorgada tindrà un pes del 10% sobre la nota final de l'assignatura.
- **Treball en Grup - Presentació d'un article científic:** Els estudiants seran repartits en grups de 4/5 alumnes i a cadascun d'aquests grups li serà assignat un tema relacionat amb els continguts de l'assignatura. Els estudiants hauran de realitzar una presentació d'aquest treball, després de llegir-lo i analitzar-lo. Les diapositives de la presentació es realitzaran en llengua anglesa. La nota atorgada tindrà un pes del 10% sobre la nota final de l'assignatura.

Per tal de superar l'assignatura els estudiants hauran de tenir:

- 1) Una nota promig d'exàmens superior a 5.
- 2) Una nota promig de l'assignatura superior a 5.
- 3) Haver realitzat el treball individual (com a mínim 4 dels 6 exercicis) i el treball en grup
- 4) Haver assistit a les sessions de pràctiques al laboratori.

En cas d'haver realitzat menys d'un terç de les evidències avaluables del curs i/o haver faltat de manera no justificada a alguna de les sessions de pràctiques al laboratori, els estudiants seran avaluats com a "no presentat".

Activitats d'avaluació

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
1 Treballs Individuals	10 %	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
1 Treballs en Grup	10 %	7	0,28	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	35 %	2	0,08	4, 5, 6, 7, 11, 12, 14, 16, 17, 22, 23, 24, 26
Examen Parcial 2	35 %	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)	10 %	3	0,12	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