

Química Física**2013/2014**

Codi: 102504

Crèdits: 6

Titulació	Tipus	Curs	Semestre
2502444 Química	OB	3	1

Professor de contacte

Nom: José Peral Pérez

Correu electrònic: Jose.Peral@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: Sí

Prerequisits

Es recomanable haver cursat "Fonaments de Química", "Química Quàntica", i "Termodinàmica Química"

Objectius

L'objectiu d'aquesta assignatura és que l'alumne consolidi la seva formació en Química Física. Per això es presentaran, d'una banda, els principals conceptes de Cinètica Química, una de les àrees fonamentals de la Química Física que l'estudiant encara ha de conèixer. D'altra banda, s'abordarà l'estudi d'altres àrees de la Química Física de naturalesa particular i, per tant, de més difícil classificació. Així, s'estudiaran els Fenòmens de Transport, tant en fase gas, com en fase líquida, la Química de Superfícies i les Cinètiques Heterogènies, la Electroquímica, tant d'equilibri com dinàmica, i les Macromolècules i els Col·loides. Tot això es farà de manera que l'estudiant pugui copsar les diferents estratègies amb les que la Química Física ataca el problema de l'estudi dels sistemes químics: a partir de visions microscòpiques o macroscòpiques, o en situacions d'equilibri o de canvi. En aquelles ocasions en les que la senzillesa dels sistemes en estudi ho permeti, s'intentaran relacionar aquestes diferents estratègies.

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 de l'àmbit de la cinètica química homogènia.
3. Analitzar processos d'adsorció en superfícies i ajust amb les diferents isoterms.
4. Aprendre de manera autònoma.
5. Classificar i analitzar les propietats dels col·loides i les macromolècules.
6. Comunicar-se oralment i per escrit en la llengua pròpia.
7. Definir els col·loides i les macromolècules.
8. Definir la química de superfícies.
9. Demostrar iniciativa i esperit emprenedor.
10. Demostrar motivació per la qualitat.
11. Descriure els components de l'electroquímica.
12. Explicar la cinètica química.
13. Gestionar l'organització i la planificació de tasques.
14. Gestionar, analitzar i sintetitzar informació.
15. Identificar els fenòmens de transport.
16. Identificar les denominacions angleses de les variables fisicoquímiques fonamentals.
17. Interpretar l'evolució de la concentració de les espècies amb el temps i la seva relació amb el mecanisme de la reacció.
18. Interpretar les dades referents a la tensió superficial (tensioactius), mullabilitat (angles de contacte) i detergència.
19. Interpretar les gràfiques d'intensitat/potencial (I/E) i la seva relació amb el funcionament de les piles.
20. Mantenir un compromís ètic.
21. Mostrar sensibilitat en qüestions mediambientals.
22. Obtenir informació, incloent-hi la utilització de mitjans telemàtics.
23. Operar amb un cert grau d'autonomia i integrar-se en poc temps en l'ambient de treball.
24. Proposar idees i solucions creatives.
25. Raonar de forma crítica.
26. Reconèixer i analitzar problemes relacionats amb la química de superfícies (adherència i detergència).
27. Reconèixer, analitzar i resoldre problemes electroquímics (piles).
28. Resoldre problemes de forma qualitativa en fenòmens de transport, col·loides i macromolècules.
29. Resoldre problemes de forma quantitativa en química de superfícies, cinètica química i electroquímica.
30. Resoldre problemes i prendre decisions.
31. Resumir un text científic relacionat amb l'assignatura, en llengua anglesa
32. Tenir destresa per al càlcul numèric.
33. Utilitzar la informàtica per al tractament i presentació d'informació.
34. Utilitzar les denominacions angleses dels diferents estats de la matèria i dels seus canvis.

Continguts

Unitat 1. CINÈTICA HOMOGÈNIA

La velocitat de les reaccions químiques.

Velocitat de reacció.

Equació de velocitat. Ordre de reacció.

Reaccions elementals i reaccions complexes.

Determinació de l'ordre de la reacció.

Integració de l'equació de velocitat. Període de semireacció.

Mètode d'aïllament.

Mètode diferencial de Van't Hoff.

(Pag. 761 Atkins, 6th Edition)

Models teòrics.

Dependència de la constant de velocitat amb la temperatura.

Equació (empírica) d'Arrhenius.

Teoria de l'estat de transició.

Formulació termodinàmica de la teoria de l'estat de transició.

(Pag. 819 Atkins, 6th Edition)

Reaccions complexes.

Mecanismes de reacció.

Determinació del mecanisme. Mètodes experimentals.

Aproximacions de l'estat estacionari i de l'equilibri.

Reaccions en dissolució.

Reaccions controlades per difusió i per activació.

Efecte de la força iònica.

Catàlisi. Tipus de catàlisi.

Catàlisi homogènia.

Catàlisi enzimàtica. Equació de Michaelis-Menten.

(Pag. 793 Atkins, 6th Edition)

Unitat 2. FENÒMENS DE TRANSPORT

Definició. Tipus.

Interpretació dels fenòmens de transport.

Teoria cinètica dels gasos

Col·lisions moleculars recorregut lliure mig

Velocitat de efusió

Conductivitat tèrmica.

Fenòmens de transport en líquids.

Difusió

Convecció

Migració i Migració-difusió.

(Pag. 723 Atkins, 6th Edition)

Unitat 3a. LA INTERFASE (QUÍMICA DE SUPERFÍCIES)

Tensió superficial.

Interfases, interfases corbades i ascens capil·lar

Termodinàmica de superfícies: isoterma d'adsorció de Gibbs.

Adsorció i tensioactius.

(Pag. 154 Atkins, 6th Edition; Pag. 467 Levine, 5ª Edició.)

Unitat 3b. CINÈTICA HETEROGÈNIA

Fracció de recobriment.

Fisisorció i quimisorció.

Isotermes d'adsorció:

a) Langmuir: diferents formes matemàtiques.

b) BET

c) Altres

Velocitats de processos superficial: adsorció, desorció i mobilitat

Catàlisi i mecanismes:

a) Langmuir-Hinshelwood

b) Eley-Rideal

(Pag. 857 Atkins, 6th Edition)

Unitat 4. ELECTROQUÍMICA

Equilibri Electroquímico.

Introducció

Equació de Nernst

Paràmetres termodinàmics

Cel·les Galvàniques

Cel·les de Transport

Aplicacions.

(Pag. 243 Atkins, 6th Edition)

Cinètica Electroquímica.

Introducció

Cinètica de transferència de càrrega en els elèctrodes

Efecte del Transport de Matèria

Mètodes Electroquímics.

(Pag. 877 Atkins, 6th Edition)

Unitat 5. COL·LOIDES I MACROMOLÈCULES

Col·loides

Classificació, preparació i aplicacions.

Estructura, superfície i estabilitat dels col·loides. Potencial zeta. Floculació.

Col·loides de associació. Micel·les, bicapes y vesícules/liposomes. Membranes.

Macromolècules

Macromolècules naturals i sintètiques.

Distribucions de pesos moleculars. Espectrometria de masses. Dispersió de llum. Sedimentació. Electroforesi. Viscositat.

Estructures de les macromolècules

(Pag. 679 Atkins, 6th Edition)

Metodologia

Activitats Dirigides

Classes Teòriques

Classes de Problemes

Activitats Supervisades

Tutories

Activitats Autònomes

Estudi, Resolució de Problemes, Lectures i Obtenció d'Informació

Activitats formatives

Títol

Hores ECTS Resultats d'aprenentatge

Tipus: Dirigides			
Classes Teòriques	38	1,52	3, 5, 6, 7, 8, 11, 12, 14, 15, 17, 19, 20, 21, 22, 24, 25, 26
Classes de Problemes	12	0,48	
Tipus: Supervisades			
Tutories	2	0,08	1, 3, 4, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 17, 18, 19, 22, 23, 24, 25, 30
Tipus: Autònomes			
Estudi, Resolució de Problemes, Lectures i Obtenció d'Informació	90	3,6	

Avaluació

Examen parcial 1
 Examen parcial 2
 Examen de Recuperació
 2 Treballs Individuals

Condicions: Per poder aprovar per parcials el promig de les notes ha de ser 5 o més gran, i és necessari treure , com a mínim, 4 en cada parcial, i haver presentat els dos treballs individuals. En cas que no es compleixin totes aquestes condicions s'haurà de fer l'examen de recuperació.

Activitats d'avaluació

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
2 Treballs Individuals	10%	2	0,08	2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 22, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 33, 34
Examen Parcial 1	45%	2	0,08	1, 2, 6, 10, 12, 14, 15, 17, 24, 25, 28, 29, 30, 32
Examen Parcial 2	45%	2	0,08	1, 3, 5, 6, 7, 8, 10, 11, 14, 18, 19, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 32
Examen de Recuperació	90%	2	0,08	1, 2, 3, 5, 7, 8, 10, 11, 12, 14, 15, 17, 18, 19, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 32

Bibliografia

Bibliografia bàsica

Physical Chemistry, P.W. Atkins, sixth edition, Oxford University Press, 1998, ISBN 0198501021

Bibliografia complementària

Fisicoquímica, (Vol. 1 i 2), Ira N. Levine, 5ª edició, McGraw Hill, 2002, ISBN 8448140052