

## Termodinàmica, Cinètica i Transformacions de Fase

2014/2015

Codi: 103285

Crèdits: 6

| Titulació                            | Tipus | Curs | Semestre |
|--------------------------------------|-------|------|----------|
| 2501922 Nanociència i Nanotecnologia | OB    | 2    | 2        |

### Professor de contacte

Nom: Eva Maria Pellicer Vilà

Correu electrònic: Eva.Pellicer@uab.cat

### Utilització de llengües

Llengua vehicular majoritària: català (cat)

Grup íntegre en anglès: No

Grup íntegre en català: Sí

Grup íntegre en espanyol: No

### Prerequisits

Es recomana tenir assolits els coneixements bàsics de Termodinàmica que s'han donat durant el primer curs.

### Objectius

Quant a coneixements:

A través d'aquesta assignatura es pretén que l'alumne adquireixi els coneixements necessaris per a la comprensió dels processos fisicoquímics, des d'un punt de vista termodinàmic i cinètic.

Quant a habilitats i destreses:

- Saber aplicar els coneixements teòrics a la resolució de problemes, a través de l'anàlisi i sentit crític dels procediments emprats i els resultats obtinguts en la resolució de les qüestions i els problemes plantejats.

- Elaborar de manera correcta els informes de les pràctiques de laboratori realitzades.

Quant a actituds, valors i normes:

- Tenir capacitat d'anàlisi i de síntesi sobre el corpus teòric de l'assignatura, la qual cosa implica saber explicar les diverses qüestions que es presentin i, també, poder arribar a un resultat fiable en la resolució dels problemes que es plantegin.

- Treballar al laboratori amb ordre i netedat, així com de manera acurada i organitzada.

- Tenir cura del material, els aparells i els instruments del laboratori.

### Competències

- Aplicar els conceptes, principis, teories i fets fonamentals relacionats amb la nanociència i la nanotecnologia a la resolució de problemes de natura quantitativa o qualitativa en l'àmbit de la nanociència i la nanotecnologia.
- Aplicar les normes generals de seguretat i funcionament d'un laboratori i les normatives específiques per a la manipulació de la instrumentació i dels productes i materials químics i biològics tenint en compte les seves propietats i els riscos.
- Aprendre de manera autònoma.
- Comunicar-se oralment i per escrit en la llengua pròpia.

- Demostrar que es comprenen els conceptes, principis, teories i fets fonamentals relacionats amb la nanociència i la nanotecnologia.
- Gestionar l'organització i la planificació de tasques.
- Interpretar les dades obtingudes mitjançant mesures experimentals, incloent-hi l'ús d'eines informàtiques, identificar-ne el significat i relacionar-les amb les teories químiques, físiques o biològiques apropiades.
- Manipular els instruments i materials estàndards propis dels laboratoris d'assaigs físics, químics i biològics per a l'estudi i l'anàlisi de fenòmens en la nanoescala.
- Mantenir un compromís ètic.
- Obtenir, gestionar, analitzar, sintetitzar i presentar informació, incluent-hi la utilització de mitjans telemàtics i informàtics.
- Proposar idees i solucions creatives.
- Raonar de forma crítica.
- Reconèixer els termes relatius als àmbits de la física, la química, la biologia, la nanociència i la nanotecnologia en llengua anglesa i fer servir l'anglès de manera eficaç per escrit i oralment en l'àmbit laboral.
- Reconèixer i analitzar problemes físics, químics i biològics en l'àmbit de la nanociència i la nanotecnologia i plantejar respostes o treballs adequats per a la seva resolució, incloent-hi en els casos necessaris l'ús de fonts bibliogràfiques.
- Resoldre problemes i prendre decisions.
- Treballar en equip i cuidar les relacions interpersonals de treball.

## Resultats d'aprenentatge

1. Analitzar i resoldre problemes d'índole termodinàmica i cinètica en les molècules i sòlids.
2. Analitzar i resoldre problemes d'índole termodinàmica.
3. Analitzar i resoldre problemes de l'àmbit de la cinètica química.
4. Analitzar situacions i problemes en l'àmbit de la física i plantejar respostes o treballs de tipus experimental utilitzant fonts bibliogràfiques.
5. Aplicar els continguts teòrics adquirits a l'explicació de fenòmens experimentals.
6. Aplicar les equacions d'estat i determinar les propietats tèrmiques de la matèria.
7. Aprendre de manera autònoma.
8. Avaluar els resultats experimentals de manera crítica i deduir-ne el significat.
9. Calcular el rendiment d'una màquina tèrmica i l'eficiència d'una de frigorífica
10. Comunicar-se oralment i per escrit en la llengua pròpia.
11. Descriure i aplicar l'estadística de Maxwell-Boltzmann.
12. Descriure la termodinàmica de l'equilibri entre fases.
13. Determinar la cinètica d'una transformació de fase en funció dels mecanismes que la produeixen.
14. Dibuixar els diagrames de fase i predir la formació de noves fases mitjançant l'ús dels diagrames de fase d'equilibri.
15. Emprar la tecnologia de la informació i la comunicació per a la documentació de casos i problemes.
16. Enumerar els principis de la termodinàmica i les seves conseqüències.
17. Explicar els conceptes de calor, treball i temperatura.
18. Explicar les transformacions entre fases mitjançant conceptes propis de la nanoescala.
19. Fer cerques bibliogràfiques de documentació científica.
20. Gestionar l'organització i la planificació de tasques.
21. Identificar els fenòmens de transport.
22. Identificar i situar l'equipament de seguretat del laboratori.
23. Manipular els materials i l'instrumental del laboratori amb seguretat.
24. Mantenir un compromís ètic.
25. Obtenir, gestionar, analitzar, sintetitzar i presentar informació, incluent-hi la utilització de mitjans telemàtics i informàtics.
26. Proposar idees i solucions creatives.
27. Raonar de forma crítica.
28. Realitzar càlculs associats als fenòmens de transport involucrats durant un canvi de fase.
29. Reconèixer els diagrames de fases d'un i dos components.
30. Reconèixer els termes relatius a la física i els materials.
31. Reconèixer en processos fisicoquímics els fenòmens d'intercanvis d'energia i les lleis que els governen.

32. Reconèixer la descripció microscòpica d'un sistema i els principis de la mecànica estadística.
33. Reconèixer la relació directa entre el formalisme termodinàmic i els experiments.
34. Resoldre problemes amb l'ajuda de bibliografia complementària proporcionada.
35. Resoldre problemes i prendre decisions.
36. Resoldre problemes relatius als fenòmens de transport.
37. Treballar en equip i cuidar les relacions interpersonals de treball.
38. Utilitzar correctament les eines informàtiques necessàries per a calcular, representar gràficament i interpretar les dades obtingudes, així com la seva qualitat.
39. Utilitzar el material i la instrumentació de laboratori de manera adequada.
40. Utilitzar programes de tractament de dades per elaborar informes.

## Continguts

### FONAMENTS DE TERMODINÀMICA CLÀSSICA

2n i 3r principi de la termodinàmica

Esponantèitat i equilibri. Energia lliure de Gibbs

### TERMODINÀMICA DE L'EQUILIBRI DE FASES

Condicions d'equilibri i estabilitat de sistemes

Equilibri de fases en substàncies pures

Equilibri de fases en sistemes multicomponents

### FENÒMENS DE TRANSPORT

Teoria cinètica dels gasos. Flux. Efusió. Conductivitat Tèrmica. Viscositat

Transport en dissolució: difusió, migració i convecció. Lleis de Fick, d'Ohm i Kohlraush. Principis d'hidrodinàmica

### CINÈTICA QUÍMICA HOMOGÈNIA

Velocitat de reacció. Equació de velocitat. Ordre i molecularitat. Integració d'equacions d'ordre enter. Efecte de la temperatura

Reaccions complexes. Mecanisme de reacció. Reaccions oposades, paral·leles i consecutives. Mètodes aproximats.

Catàlisi homogènia. Àcid-base. Red-ox. Enzimàtica.

## Metodologia

En aquesta assignatura es contempla tant l'adquisició de coneixements mitjançant classes magistrals teòriques, com de resolució de problemes. Així mateix, també hi són contemplades activitats formatives de tipus autònom, on l'alumne haurà de redactar informes de pràctiques de laboratori i realitzar entregues d'exercicis que s'aniran demanant al llarg del curs.

## Activitats formatives

| Títol                       | Hores | ECTS | Resultats d'aprenentatge      |
|-----------------------------|-------|------|-------------------------------|
| Tipus: Dirigides            |       |      |                               |
| Clases magistrals teòriques | 30    | 1,2  | 6, 12, 14, 16, 17, 21, 29, 33 |

|                                                |    |      |                                       |
|------------------------------------------------|----|------|---------------------------------------|
| Classes de problemes                           | 15 | 0,6  | 1, 2, 3, 6, 13, 14, 28                |
| Pràctiques de laboratori                       | 8  | 0,32 | 5, 7, 20, 22, 35, 37, 39              |
| Tipus: Supervisades                            |    |      |                                       |
| Tutories                                       | 5  | 0,2  | 10, 24                                |
| Tipus: Autònomes                               |    |      |                                       |
| Aprentatge autònom (estudi)                    | 30 | 1,2  | 6, 12, 13, 14, 16, 17, 21, 28, 29, 33 |
| Redacció d'informes de laboratori experimental | 8  | 0,32 | 4, 5, 7, 8, 10, 24, 27, 38, 40        |
| Resolució de problemes                         | 15 | 0,6  | 1, 2, 3, 6, 13, 14, 27, 28, 35        |

## Avaluació

L'avaluació de l'assignatura comprèn:

(1) BLOCS FONAMENTS DE TERMODINÀMICA CLÀSSICA I TERMODINÀMICA DE L'EQUILIBRI DE FASES

- Examen (60% de la qualificació).
- Treballs d'aula (15% de la qualificació global).
- Informes de pràctiques de laboratori (25% de la qualificació).

(2) BLOCS FENÒMENS DE TRANSPORT I CINÈTICA QUÍMICA HOMOGÈNIA

- Examen (50% de la qualificació).
- Treballs d'aula (40% de la qualificació global).
- Informes de pràctiques de laboratori (10% de la qualificació).

El pes dels apartats (1) i (2) sobre la qualificació global és el mateix (50%).

La realització dels exercicis/tests de "Treball d'aula" de l'apartat (1) i les pràctiques de laboratori (així com el lliurament d'informes de pràctiques corresponents) dels apartats (1) i (2) és obligatòria, altrament l'alumne no tindrà dret a presentar-se a l'examen.

És necessari tenir com a mínim una qualificació de 4/10 en l'examen. En cas contrari, no es ponderarà la nota amb la resta d'activitats d'avaluació (treballs d'aula i informes de pràctiques de laboratori) i, per tant, l'alumne haurà de presentar-se a l'examen de repesca.

## Activitats d'avaluació

| Títol                   | Pes   | Hores | ECTS | Resultats d'aprenentatge                                                 |
|-------------------------|-------|-------|------|--------------------------------------------------------------------------|
| Laboratori experimental | 17.5% | 10    | 0,4  | 7, 10, 15, 19, 20, 22, 24, 25, 26, 27, 30, 35, 37, 38, 39, 40            |
| Proves escrites         | 55%   | 9     | 0,36 | 1, 2, 3, 5, 6, 9, 11, 12, 13, 14, 16, 17, 18, 21, 28, 29, 31, 32, 33, 36 |
| Resolució de problemes  | 27.5% | 20    | 0,8  | 1, 2, 3, 4, 6, 8, 13, 14, 19, 23, 27, 28, 34                             |

## Bibliografia

ATKINS, P. W. (PETER WILLIAM), 1940- ; DE PAULA, JULIO.

Química física. 8a ed. Buenos Aires: Médica Panamericana, cop. 2008

LEVINE, IRA N., 1937-. Fisicoquímica. 5a ed.

Madrid: McGraw-Hill / Interamericana, cop. 2004. Vol. 1

LEVINE, IRA N., 1937-. Problemas resueltos de fisico química : del texto de teoría. Madrid: McGraw-Hill, 2005