

Termodinàmica Química

Codi: 102502

Crèdits: 6

Titulació	Tipus	Curs	Semestre
2502444 Química	OB	2	2

Professor/a de contacte

Nom: Vicenç Branchadell Gallo

Correu electrònic: Vicenc.Branchadell@uab.cat

Utilització d'idiomes a l'assignatura

Llengua vehicular majoritària: català (cat)

Grup íntegre en anglès: No

Grup íntegre en català: Sí

Grup íntegre en espanyol: No

Equip docent

Vicenç Branchadell Gallo

Àngels González Lafont

Prerequisits

Fonaments de Química

Experimentació i Documentació en Química

Química Quàntica

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 fonaments de Química 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 i heterogenis d'un o més components. D'altra banda, també es vol introduir la complementaritat de les visions macroscòpica i microscòpica dels sistemes per a calcular i interpretar les seves propietats termodinàmiques utilitzant les bases de la Termodinàmica Estadística.

Competències

- "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."
- 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.
- 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. Distribució de Boltzmann. Funció de partició d'un sistema.
2. Sistemes de partícules independents. Funció de partició molecular. Aplicació a l'estudi de propietats termodinàmiques de gasos ideals.
3. Interpretació molecular de l'equilibri químic. Termoquímica Molecular.
4. Lleis de la Termodinàmica.
5. 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. Equilibri químic.
6. A. Estabilitat de les diferents fases d'un sistema. Equacions de Clapeyron i Clausius-Clapeyron. Diagrames de fases de sistemes d'un component.
- B. Dissolucions no electrolítiques. Diagrames de fases de sistemes de dos components.

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	30	1,2	3, 4, 6, 7, 10, 11, 12, 14, 15, 16, 19, 22, 23, 24, 25, 27, 29, 31
Classes de Problemes	10	0,4	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	22	0,88	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: 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	5	0,2	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

Exàmens escrits: Es realitzaran dos exàmens parcials al llarg del curs, en les dates fixades per la coordinació. Cadascun d'aquests exàmens tindrà un pes del 35% sobre la nota final. La nota mínima per poder fer mitjana entre els exàmens parcials és 3,5 i la nota mitjana mínima dels dos exàmens és 4. Si no s'arriba a aquests mínims, al final del curs es poden recuperar un o els dos exàmens parcials. La nota obtinguda en la recuperació substituirà la nota obtinguda en el primer intent. També serà possible presentar-se a les recuperacions amb l'objectiu de millorar nota. En aquest cas l'última nota obtinguda en cada parcial és la que preval. Per tenir dret a presentar-se a una recuperació és obligatori haver fet l'examen parcial.

Pràctiques de laboratori: Les pràctiques de laboratori s'avaluaran a partir dels resultats obtinguts en cada pràctica i d'un qüestionari que s'haurà de respondre l'última sessió de practiques. La nota mitjana obtinguda de les pràctiques al laboratori equivaldrà al 15 % de la nota final de l'assignatura.

Treball Individual: Al llarg del curs es proposaran diversos exercicis avaluable per resoldre a l'aula o fora de l'aula. Les notes obtingudes en aquests exercicis tindran un pes del 15 % sobre la qualificació final de l'assignatura.

Els requisits per superar l'assignatura són:

- 1) La nota de cada examen parcial ha de ser igual o superior a 3,5 i nota mitjana d'exàmens parcials igual o superior a 4
- 2) La nota mitjana de l'assignatura ha de ser igual o superior a 5.
- 3) L'assistència a les sessions de pràctiques de laboratori és obligatòria

L'assignatura es considerarà no avaluable si no s'ha fet cap dels exàmens parcials.

Activitats d'avaluació

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Examen Parcial 1	35 %	3	0,12	4, 5, 6, 7, 11, 12, 14, 16, 17, 22, 23, 24, 26
Examen Parcial 2	35 %	3	0,12	3, 4, 5, 6, 7, 10, 11, 12, 14, 16, 17, 22, 23, 24, 25, 26, 29
Examen de Recuperació	70 %	4	0,16	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)	15 %	8	0,32	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
Treballs Individuals	15 %	5	0,2	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

Bibliografia

- Thermodynamics and Statistical Mechanics, John M. Seddon and Julian D. Gale, Royal Society of Chemistry, 2002.
- Físicoquímica, Raymond Chang, McGraw Hill, 2008 (Tercera Ed.).
- Química Física, Peter Atkins y Julio de Paula, Editorial Medica Panamericana, 2008 (Octava Ed.).
- Química Molecular Estadística, Iñaki Tuñón y Estanislao Silla, Editorial Sintesis, 2008.
- FísicoQuímica, Ira N. Levine, Editorial McGaw Hill, 2004.