Universitat Autònoma de Barcelona

2018/2019

Química Física

Codi: 102504
Crèdits: 6

Titulació	Tipus	Curs	Semestre
2502444 Química	OB	3	1

Professor/a de contacte

Nom: Josep Maria Lluch López
Correu electrònic: JoseMaria.Lluch@uab.cat

Utilització d'idiomes a l'assignatura

Llengua vehicular majoritària: català (cat)
Grup íntegre en anglès: No
Grup íntegre en català: No
Grup íntegre en espanyol: No

Equip docent

Iluminada Gallardo García
José Peral Pérez

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

- "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 de l'àmbit de la cinètica química homogènia.
3. Analitzar processos d'adsorció en superfícies i ajust amb les diferents isotermes.
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 la 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

Velocitat de reacció.

Equació de velocitat. Ordre de reacció.

Reaccions elementals i reaccions complexes.

Mètodes experimentals.

Determinació de l'ordre de la reacció.

Integració de l'equació de velocitat. Reaccions d'ordre 0, 1, 2 i n.

Període de semireacció.

Mètode diferencial de Van't Hoff.

Dependència de la constant de velocitat amb la temperatura.

Equació d'Arrhenius.

Energia d'activació, una magnitud experimental.

Reaccions complexes. Mecanismes de reacció.

Reaccions reversibles.

Reaccions consecutives.

Reaccions paral·leles.

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

Reaccions en cadena lineal i ramificada. Límits d'explosió.

Fonaments bàsics de Termodinàmica Estadística. Funció de partició.

Teoria de l'estat de transició.

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

Interpretació de les differents magnituds. Relació entre elles.

Efecte túnel.

Reaccions en dissolució.

Reaccions controlades per difusió i per activació.

Catàlisi. Tipus de catàlisi.

Catàlisi homogènia.

Catàlisi enzimàtica. Equació de MichaelisMenten.

Mecanisme de Michaelis-Menten.

Mecanisme de Briggs-Haldane.

Unitat 2. FENÒMENS DE TRANSPORT

Definició. Tipus.

Teoria cinètica dels gasos.

Distribució de velocitats.

Col·lisions moleculars recorregut lliure mig.

Velocitat de efusió. Llei de Graham.

Transport en un gas ideal. Primera llei de Fick de la difusió.

Conductivitat tèrmica.

Fenòmens de transport en líquids.

Conductància i conductivitat.

Electròlits forts i febles.

Llei de Kohlrausch.

Llei de dilució d'Ostwald.

Mobilitat dels ions.

Números de transport.

Difusió.

Equació de Nernst-Einstein.

Equació de Stokes-Einstein.

Segona llei de Fick de la difusió.

Difusió amb convecció.

Equació d'Einstein-Schmoluchowski.

Unitat 3a. LA INTERFASE (QUIMICA DE SUPERFICIES)

Interfases.

Tensió superficial.

Interfases corbades.

Llei de Laplace.

Ascens capil·lar

Termodinàmica de superfícies: isoterma d'adsorció de Gibbs.

Adsorció i tensioactius.

Unitat 3b. CINÈTICA HETEROGÈNIA

Fisisorció i quimisorció.

Fracció de recobriment.

Isotermes d'adsorció: Langmuir, Freundlich, BET i Temkin.

Catàlisi heterogènia.

Mecanisme de Langmuir-Hinshelwood

Mecanisme d'Eley-Rideal

Unitat 4. ELECTROQUÍMICA

Equilibri Electroquímic.

Introducció

Equació de Nernst

Paràmetres termodinàmics

Cel.les Galvàniques

Cel.les de Transport

Aplicacions.

Cinètica Electroquímica.

Introducció

Cinètica de transferència de càrrega en els elèctrodes

Efecte del Transport de Matèria

Mètodes Electroquímics.

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

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

Avaluació de l'Assignatura

Aquesta assignatura utilitzarà l'avaluació continuada par verificar que l'alumne ha assolit les competències determinades en el pla d'estudis.

A efectes d'avaluació, l'assignatura es divideix en dos parts: exàmens i treballs de seguiment

Exàmens: (80%)

Al llarg del curs es realitzaran dos exàmens parcials (P1, P2) . Cadascun dels exàmens es puntuarà amb una nota entre 0 i 10**.**

Treballs de Seguiment: (20%)

Al llarg del curs es realitzaran dues sèries de proves (S1, S2) (recollir problemes fets a casa, treballs, test o problemes a l'aula, etc) que seran considerats evidències del treball personal de l'alumne. Cadascuna de les sèries de proves corresponents a les evidències dels treballs de seguiment donarà lloc a una nota entre 0 i 10, i no són recuperables.

Qualificacions:

Alumnes que superin l'assignatura per curs:

Per superar l'assignatura per curs s'han de complir les tres condicions següents:

1) La nota final de CURS (NFC) ha de ser 5,0 com a mínim.

$$NFC = 0{,}80\ [0{,}50(P1 + P2)] + 0{,}20\ [0{,}50(S1 + S2)]$$

2) Les dues notes d'examen P1 i P2 han de ser 4,0 com a mínim.

3) Es obligatori tenir qualificació en les dues sèries de treballs de seguiment

Alumnes que no superin l'assignatura per curs

i alumnes que vulguin millorar la seva nota de curs

Els alumnes que no superin l'assignatura per curs, d'acord amb el paràgraf anterior, o que vulguin millorar la seva qualificació, podran presentar-se a un examen de recuperació que inclourà tota la matèria.

La nota de l'examen de recuperació substituirà la nota que es pogués tenir del conjunts dels dos parcials i, per tant, tindrà un pes del 80% (la nota dels treballs de seguiment no es podrà recuperar).

Per participar a la recuperació l'alumnat ha d'haver estat prèviament avaluat en un conjunt d'activitats el pes de les quals equivalgui a un mínim de dues terceres parts de la qualificació total de l'assignatura

La qualificació de **No avaluable** s'assolirà si el número d'activitats d'avaluació és inferior al 50% de les programades per a l'assignatura.

Atenció:

Els telèfons mòbils o qualsevol aparell de telecomunicació han d'estar desconnectats i guardats a les bosses o motxilles durant els exàmens i proves. L'ús d'aquests aparells està rigorosament prohibit. En cas que es detecti que un estudiant el té activat, serà expulsat del examen o prova amb la conseqüència d'un suspens a l'assignatura.

Si es detecta copiant a un/una alumne/a, se li instarà a sortir de l'aula amb la conseqüència d'un suspens a l'assignatura.

Activitats d'avaluació

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Examen Parcial 1	40%	2	0,08	1, 2, 6, 10, 12, 14, 15, 17, 24, 25, 28, 29, 30, 32
Examen Parcial 2	40%	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	80%	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
Treballs de seguiment	20%	2	0,08	2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 33, 34

Bibliografia

Bibliografia bàsica

Physical Chemistry, P.W. Atkins, 8th edition, Oxford University Press, 2006

Bibliografia complementària

Fisicoquímica, (Vol. 1 i 2), Ira N. Levine, 5ª edició, McGraw Hill, 2004