

**Termodinàmica i Cinètica**

Codi: 105039

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**

Àngels González Lafont

**Prerequisits**

Fonaments de Química I i II, Física I i II, Matemàtiques I i II, Química Quàntica,

**Objectius**

L'objectiu d'aquesta assignatura és que l'alumne avanci en la seva formació en Química Física. En aquesta assignatura es preténaprofundir 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. Finalment, es farà una introducció a la Cinètica Química, posant èmfasi en l'estudi de mecanismes de reacció incloent la interpretació microscòpica de la velocitat de reacció.

**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.
- 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. Analitzar i resoldre problemes de l'àmbit de la cinètica química homogènia.
4. Aplicar els aspectes teòrics dels equilibris de fases per entendre els processos de destil·lacions.
5. Aplicar els models esmentats amb finalitats predictives sabent-ne valorar les limitacions.
6. Aprendre de manera autònoma.
7. Comunicar-se oralment i per escrit en la llengua pròpia.
8. Definir amb bases entròpiques l'espontaneïtat d'un procés.
9. Demostrar iniciativa i esperit emprenedor.
10. Demostrar motivació per la qualitat.
11. Entendre com la presència de solut afecta les propietats de les dissolucions.
12. Enumerar i descriure les bases de la termodinàmica estadística.
13. Explicar els principis de termodinàmica clàssica i les seves aplicacions en química.
14. Explicar la cinètica química.
15. Gestionar l'organització i la planificació de tasques.
16. Gestionar, analitzar i sintetitzar informació.
17. Identificar les denominacions angleses de la variables fisicoquímiques fonamentals.
18. Interpretar els comportaments moleculars i els fenòmens d'equilibri en gasos ideals.
19. Interpretar l'evolució de la concentració de les espècies amb el temps i la seva relació amb el mecanisme de la reacció.
20. Mantenir un compromís ètic.
21. Obtenir informació, incloent-hi la utilització de mitjans telemàtics.
22. Operar amb un cert grau d'autonomia i integrar-se en poc temps en l'ambient de treball.
23. Proposar idees i solucions creatives.
24. Raonar de forma crítica.
25. Reconèixer en processos naturals o industrials els fenòmens d'intercanvis d'energia i les lleis que els governen.
26. Relacionar propietats macroscòpiques i propietats d'àtoms i molècules individuals.
27. Relacionar un model teòric amb els fenòmens d'equilibris químics.
28. Resoldre problemes de forma quantitativa en química de superfícies, cinètica química i electroquímica.
29. Resoldre problemes i prendre decisions.
30. Tenir destresa per al càlcul numèric.
31. Utilitzar els conceptes i les formulacions dels potencials químics i electroquímics en processos reals.
32. Utilitzar la informàtica per al tractament i presentació d'informació.
33. Utilitzar les denominacions angleses dels diferents estats de la matèria i dels seus canvis.

## Continguts

### 1. Equilibri de fases en sistemes d'un component

2. Dissolucions
3. Equilibri de fases en sistemes de més d'un component
4. Introducció a la termodinàmica estadística
5. Propietats termodinàmiques del gas ideal
6. Interpretació molecular de l'equilibri químic
7. Introducció a la cinètica química
8. Mecanismes de reacció
9. Models teòrics de les velocitats de reacció

## Metodologia

Activitats dirigides:

Classes teòriques, classes de problemes, pràctiques de laboratori

Activitats Autònomes:

Estudi, resolució de problemes, lectures i obtenció d'informació, preparació de les pràctiques, cerca bibliogràfica

## Activitats formatives

| Títol                    | Hores | ECTS | Resultats d'aprenentatge  |
|--------------------------|-------|------|---|
| Tipus: Dirigides         |       |      |   |
| Classes de problemes     | 13    | 0,52 | 2, 3, 5, 15, 16, 21, 24, 28, 29, 30, 31, 32                                       |
| Classes teòriques        | 33    | 1,32 | 2, 3, 4, 7, 8, 11, 12, 14, 15, 17, 18, 19, 26, 27, 29, 33                         |
| Pràctiques de laboratori | 16    | 0,64 | 1, 4, 6, 9, 10, 11, 16, 20, 21, 22, 23, 24, 29, 32                                |
| Tipus: Autònomes         |       |      |   |
| Treball personal         | 65    | 2,6  | 1, 5, 6, 8, 9, 12, 13, 14, 15, 16, 18, 20, 21, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 31, 32 |

## Avaluació

### 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 avaluables 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   |
|--------------------------|-----|-------|------|--|
| Exàmens                  | 70  | 10    | 0,4  | 2, 3, 4, 5, 7, 8, 11, 12, 13, 14, 18, 19, 24, 25, 26, 27, 28, 31   |
| Pràctiques de laboratori | 15  | 8     | 0,32 | 2, 3, 6, 15, 16, 20, 21, 22, 23, 24, 29, 30, 32  |
| Treball individual       | 15  | 5     | 0,2  | 1, 2, 3, 4, 5, 6, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 16, 17, 18, 19, 21, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 33 |

### 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 Síntesis, 2008.- FísicoQuímica, Ira N. Levine, Editorial McGraw Hill, 2004