

Termodinàmica i cinètica

Codi: 100888

Crèdits: 6

Titulació	Tipus	Curs	Semestre
2500252 Bioquímica	FB	1	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

Prerequisits

Tot i que no hi ha pre-requisits oficials, és convenient que l'alumne repassi el càlcul de derivades i integrals i els conceptes inclosos en la Química de Batxillerat.

Objectius

L'objectiu general de l'assignatura és posar en contacte l'estudiant, per primera vegada, amb l'estudi teòric dels fenòmens químics i bioquímics, és a dir, amb les aportacions de la Química Física a una ciència de la vida com la Bioquímica. A la llarga, es vol que l'estudiant prengui consciència de la importància de la Química Física com a base teòrica de la Bioquímica, i es familiaritzi amb la seva metodologia teòrica i experimental. L'objectiu més general del programa teòric és ajudar a l'estudiant a comprendre els fenòmens químics i bioquímics del món macroscòpic. S'estudiaran doncs, els conceptes bàsics de Termodinàmica i Cinètica Química. Alhora, també es vol que l'estudiant sigui conscient del doble caràcter, teòric-experimental, de la Química Física. Un altre objectiu general és donar a l'estudiant una visió interdisciplinària de la Bioquímica, en concret, la seva estreta relació amb la Química, la Física, i les Matemàtiques.

Objectius específics:

- 1) Conèixer les lleis de la Termodinàmica Clàssica i ser capaç d'aplicar-les a l'estudi de sistemes químics i biològics.
- 2) Conèixer els fonaments de la Cinètica Química i ser capaç d'aplicar-los en l'estudi de reaccions químiques i bioquímiques.
- 3) Distingir entre fenòmens governats per la Termodinàmica i fenòmens governats per la Cinètica.

Competències

- Actuar amb responsabilitat ètica i amb respecte pels drets i deures fonamentals, la diversitat i els valors democràtics.
- Actuar en l'àmbit de coneixement propi avaluant les desigualtats per raó de sexe/gènere.
- Actuar en l'àmbit de coneixement propi valorant l'impacte social, econòmic i mediambiental.
- Col·laborar amb altres companys de treball.
- Gestionar la informació, organització i planificació del treball.
- Identificar l'estructura molecular i explicar la reactivitat de les diferents biomolècules: carbohidrats, lípids, proteïnes i àcids nucleics.
- Interpretar resultats experimentals i identificar elements consistents i inconsistents.
- Tenir capacitat d'autoavaluació.

- Tenir iniciativa i esperit emprenedor.
- Utilitzar els fonaments de matemàtiques, física i química necessaris per comprendre, desenvolupar i avaluar els processos químics de la matèria viva.

Resultats d'aprenentatge

1. Actuar amb responsabilitat ètica i amb respecte pels drets i deures fonamentals, la diversitat i els valors democràtics.
2. Actuar en l'àmbit de coneixement propi avaluant les desigualtats per raó de sexe/gènere.
3. Actuar en l'àmbit de coneixement propi valorant l'impacte social, econòmic i mediambiental.
4. Aplicar els principis de la termodinàmica i la cinètica als processos bioquímics.
5. Col·laborar amb altres companys de treball.
6. Descriure els mecanismes de reacció que operen en els principals processos bioquímics.
7. Descriure les lleis que regeixen l'equilibri químic de les diverses reaccions bioquímiques.
8. Gestionar la informació, organització i planificació del treball.
9. Interpretar resultats experimentals i identificar elements consistents i inconsistents.
10. Tenir capacitat d'autoavaluació.
11. Tenir iniciativa i esperit emprenedor.

Continguts

BLOC 1. CINÈTICA

1. Fonaments de cinètica química.

Velocitat de reacció. Equació de velocitat. Ordres de reacció: mètode diferencial. Integració d'equacions de velocitat. Temps de semireacció. Mètode d'aïllament. Tècniques experimentals. Velocitat de reacció i temperatura. Interpretació microscòpica de la velocitat d'una reacció.

2. Mecanismes de reacció.

Mecanisme de reacció. Reaccions reversibles. Reaccions paral·leles. Reaccions consecutives. Aproximació de l'estat estacionari. Aproximació de l'equilibri previ. Etapa determinant de la velocitat. Reaccions en dissolució. Catàlisi. Catàlisi àcid-base. Catàlisi enzimàtica. Mecanisme de Michaelis-Menten.

BLOC 2. FONAMENTS DE TERMODINÀMICA

3. Introducció a la termodinàmica.

Introducció a la termodinàmica. El gas ideal. Energia, calor i treball. Tipus de sistemes. Treball d'expansió. Processos reversibles. Transferència d'energia en forma de calor. Principis de la Termodinàmica.

4. Termoquímica.

Entalpia. Entalpies de canvi de fase. Entalpies de reacció. Calorimetria. Entalpies de formació estàndard. Entalpia d'enllaç. Entalpia de solució. Entalpia de reacció i energia interna. Variació de l'entalpia de reacció amb la temperatura. Propietats termodinàmiques dels combustibles.

5. Espontaneïtat i equilibri.

Segon principi. Variació d'entropia en alguns processos. Expansió adiabàtica reversible d'un gas ideal. Interpretació molecular de l'entropia. Tercer principi. Entropies absolutes i entropia de reacció. Energia de Gibbs. Equacions fonamentals d'un sistema tancat. Energia de Gibbs i treball màxim. La composició com a variable. Equilibri material

BLOC 3. EQUILIBRI MATERIAL

6. Equilibri de fases.

Equilibri de fases en sistemes d'un component. Diagrama de fases P-T. Corbes d'escalfament i refredament. Punt triple i punt crític. Equació de Clapeyron. Equació de Clausius-Clapeyron. Equilibri de fases sòlid-sòlid. La regla de les fases.

7. Dissolucions.

Propietats molars parcials. Potencial químic. Llei de Raoult. Termodinàmica de mescles. Dissolució ideal. Desviacions del comportament ideal. Dissolució diluïda ideal. Llei de Henry. Propietats col·ligatives. Energia de Gibbs de mescla en una solució real.

8. Equilibri químic.

Introducció. Energia de Gibbs de reacció. Grau d'avenç de reacció i energia de Gibbs de reacció. Quocient de reacció i constant d'equilibri. Energia de Gibbs de reacció estàndard. Reaccions en solució. Equilibris heterogenis. Variació de la constant d'equilibri amb la temperatura. Desplaçament de l'equilibri. Reaccions àcid-base.

Metodologia

L'assignatura constarà de dos tipus d'activitats docents:

1. Classes teòriques

El professor desenvoluparà els continguts de l'assignatura de manera presencial o virtual, d'acord amb el que en tot moment determinin les autoritats acadèmiques. Tot el contingut de les classes teòriques estarà disponible prèviament al campus virtual.

2. Classes de Problemes

Per a cada tema es proposaran diversos problemes que s'hauran de resoldre per part dels alumnes, amb la supervisió del professor. En les classes de problemes es resoldran els dubtes que hagi pogut generar la resolució dels problemes.

Nota: es reservaran 15 minuts d'una classe, dins del calendari establert pel centre/titulació, per a la complementació per part de l'alumnat de les enquestes d'avaluació de l'actuació del professorat i d'avaluació de l'assignatura/mòdul.

Activitats formatives

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Tipus: Dirigides			
Classes de problemes	15	0,6	4, 7, 9
Classes de teoria	30	1,2	4, 6, 7, 9
Tipus: Supervisades			
Treball en grup	10	0,4	4, 5, 8, 9
Tipus: Autònomes			
Estudi i resolució de problemes	87	3,48	4, 6, 7, 8, 9

Avaluació

Exàmens

Al llarg del curs es realitzaran dos exàmens parcials. Els pesos d'aquests exàmens en la nota final seran del 30% i del 50%, respectivament, de manera que el conjunt dels dos exàmens parcials representarà el 80% de la nota final.

La nota mínima d'un examen parcial que permet calcular la mitjana del curs és de 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 reemplaçarà la nota obtinguda en el primer intent. També és possible presentar-se a les recuperacions per 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-se presentat als dos exàmens parcials.

Treball de seguiment

Al llarg del curs es recolliran un cert nombre de proves del seguiment de l'alumne (problemes resolts individualment o en grup, proves curtes d'aula, etc). La nota mitjana d'aquests proves representarà el 20% de la nota final

Els requisits per superar l'assignatura són:

1. La nota de cada examen parcial ha de ser igual o superior a 4
2. La nota mitjana de l'assignatura ha de ser igual o superior a 5

L'assignatura es considerarà no avaluable quan les activitats d'avaluació realitzades tinguin una ponderació inferior al 50% en la qualificació final. Per optar a la qualificació "Matrícula d'honor" es tindran en compte de manera preferent les notes obtingudes en els exàmens parcials.

Activitats d'avaluació

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Avaluació en grup	20%	3	0,12	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11
Prova parcial 1	30%	2	0,08	4, 6, 7
Prova parcial 2	50%	3	0,12	4, 6, 7, 9

Bibliografia

- 1) P. W. Atkins, J. de Paula *Atkins. Química Física*, 8ª edició, Editorial Panamericana, 2008. Disponible electrònicament.
- 2) P.W. Atkins, J. de Paula, *Physical Chemistry for the Life Sciences*, Oxford University Press, 2006.
- 3) R. Chang, J. W..Thoman, John W. Jr.. *Physical Chemistry for the Chemical Sciences*. University Science Books, 2014. Disponible electrònicament,
- 4) R. Chang, *Fisicoquímica para las ciencias químicas y biológicas*, McGraw-Hill, 2008, 3a ed.
- 5) I. N. Levine, *Principios de fisicoquímica*, 6ª edició, McGraw Hill, 2014. Disponible electrònicament.

Programari

No n'hi ha