

Termodinàmica i Cinètica

Codi: 105039

Crèdits: 6

Titulació	Tipus	Curs	Semestre
2502444 Química	OB	2	2

Professor/a de contacte

Nom: Àngels Gonzalez Lafont

Correu electrònic: angels.gonzalez@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 Gonzalez Lafont

Josep Maria Lluch López

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 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 de la matèria 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 dels mecanismes de reacció i la interpretació microscòpica de la velocitat de reacció que proporciona la Teoria de l'Estat de Transició.

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 les 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 material, energia de Gibbs i potencial químic.

2. Equilibri de fases en sistemes d'un component
3. Dissolucions
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. Teoria de l'Estat de Transició

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

Per ordre de la Vicerectora de Qualitat i d'Accreditació Acadèmica s'ha d'indicar a les guies docents que el professorat haurà de destinar aproximadament uns 15 minuts d'alguna classe a permetre que el seu alumnat pugui respondre les enquestes d'avaluació de l'actuació docent i d'avaluació de l'assignatura o mòdul.

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	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. Per poder fer mitjana amb la resta d'activitats d'avaluació, la nota mínima de cada examen parcial ha de ser de 4,0. Si no s'arriba a aquests

mínims, al final del curs es podrà realitzar un examen de recuperació de tot el contingut de l'assignatura. La nota obtinguda en la recuperació substituirà la nota obtinguda en el primer intent. Només es podran presentar a l'examen de recuperació aquells alumnes que no hagin aconseguit la nota mínima dels exàmens parcials, i 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 o mòdul. Per tant, l'alumnat obtindrà la qualificació de "No Avaluable" quan les activitats d'avaluació realitzades tinguin una ponderació inferior al 67% en la qualificació final.

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 4,0. La nota mínima de l'examen de recuperació ha de ser igual a 4,0.
- 2) La nota mitjana de l'assignatura ha de ser igual o superior a 5,0.
- 3) L'assistència a les sessions de pràctiques de laboratori és obligatòria.

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

Llibres disponibles a la Biblioteca de Ciència i Tecnologia (UAB):

Físicoquímica / Ira N. Levine ; traducción: Ángel González Ureña ; con la colaboración de Antonio Rey Gayo [i 4 més]	Levine, Ira N., 1937-, autor	Document físic
Físicoquímica para las ciencias químicas y biológicas / Raymond Chang ; traducción técnica Rosa Zugazagoitia Herranz ; revisión técnica Alberto Rojas Hernández ... [et al.]	Chang, Raymond	Document físic
Physical chemistry / Ira N. Levine	Levine, Ira N.	Document físic
Physical chemistry for the life sciences / Peter Atkins, Julio de Paula		

	Atkins, P. W. (Peter William), 1940-	Document físic
Química física / Peter Atkins, Julio de Paula	Atkins, P. W. (Peter William), 1940-	Document físic
Química física / Peter Atkins y Julio de Paula ; traducido por Ernesto Timmermann... [et. al.]	Atkins, P. W. (Peter William), 1940- autor	Document electrònic
Química molecular estadística : termodinámica estadística para químicos y bioquímicos / Iñaki Tuñón, Estanislao Silla	Tuñón, Iñaki	Document físic
Thermodynamics and statistical mechanics [Recurs electrònic] / John M. Seddon & Julian D. Gale	Seddon, John M.	Document electrònic
Fundamentos de cinética química / S. R. Logan ; traducción Concepción Pando García-Pumarino	Logan, S. R.	Document físic
Physical chemistry for the biosciences / Raymond Chang	Chang, Raymond	Document físic
Principios de fisicoquímica / Ira N. Levine ; revisión técnica: Carlos Amador Bedolla, René Huerta Cevallos ; [traducción: Gabriel Nagore Cázares]	Levine, Ira N.	Document físic
Principios de fisicoquímica / Ira N. Levine (Chemistry Department Brooklyn College City University of New York, Brooklyn, New York) ; revisión técnica, Carlos Amador Bedolla (Universidad Nacional Autòn)	Levine, Ira N. 1937- autor	Document electrònic

Programari

Per a les pràctiques computacionals s'utilitzarà el següent programari:

Gaussview 6.0.16

Gaussian 16, B.01