

Termodinámica y Cinética

Código: 105039
Créditos ECTS: 6

Titulación	Tipo	Curso	Semestre
2502444 Química	OB	2	2

Contacto

Nombre: Àngels Gonzalez Lafont

Correo electrónico: angels.gonzalez@uab.cat

Uso de idiomas

Lengua vehicular mayoritaria: catalán (cat)

Algún grupo íntegramente en inglés: No

Algún grupo íntegramente en catalán: Sí

Algún grupo íntegramente en español: No

Equipo docente

Àngels Gonzalez Lafont

Josep Maria Lluch López

Prerequisitos

Fundamentos de Química I y II, Física I y II, Matemáticas I y II, Química Cuántica

Objetivos y contextualización

El objetivo de esta asignatura es que el alumno avance en su formación en Química Física. En esta asignatura se pretende profundizar en la aplicación de las leyes de la Termodinámica a sistemas químicos concretos, utilizando el concepto de potencial químico en sistemas homogéneos y heterogéneos de uno o más componentes. Por otra parte, también se quiere introducir la complementariedad de las visiones macroscópica y microscópica de los sistemas para calcular e interpretar sus propiedades termodinámicas utilizando las bases de la Termodinámica Estadística. Finalmente, se hará una introducción a la Cinética Química, poniendo énfasis en el estudio de mecanismos de reacción y la interpretación microscópica de la velocidad de reacción que proporciona la Teoría del Estado de Transición.

Competencias

- Adaptarse a nuevas situaciones.
- Aplicar los conocimientos químicos a la resolución de problemas de naturaleza cuantitativa o cualitativa en ámbitos familiares y profesionales.
- Aprender de forma autónoma.
- Comunicarse de forma oral y escrita en la lengua nativa.
- Demostrar iniciativa y espíritu emprendedor.
- Demostrar motivación por la calidad.
- Demostrar que comprende los conceptos, principios, teorías y hechos fundamentales de las diferentes áreas de la Química.
- Gestionar la organización y planificación de tareas.
- Gestionar, analizar y sintetizar información.

- Interpretar los datos obtenidos mediante medidas experimentales, incluyendo el uso de herramientas informáticas, identificar su significado y relacionarlos con las teorías químicas, físicas o biológicas apropiadas.
- Mantener un compromiso ético.
- Obtener información, incluyendo la utilización de medios telemáticos.
- Operar con un cierto grado de autonomía e integrarse en poco tiempo en el ambiente de trabajo.
- Poseer destreza para el cálculo numérico.
- Proponer ideas y soluciones creativas.
- Razonar de forma crítica.
- Reconocer y analizar problemas químicos y plantear respuestas o trabajos adecuados para su resolución, incluyendo en casos necesarios el uso de fuentes bibliográficas.
- Resolver problemas y tomar decisiones.
- Utilizar correctamente la lengua inglesa en el ámbito de la Química.
- Utilizar la informática para el tratamiento y presentación de información.

Resultados de aprendizaje

1. Adaptarse a nuevas situaciones.
2. Analizar y resolver problemas de índole termodinámico.
3. Analizar y resolver problemas del ámbito de la Cinética Química homogénea.
4. Aplicar dichos modelos con fines predictivos sabiendo valorar sus limitaciones.
5. Aplicar los aspectos teóricos de los equilibrios de fases para entender los procesos de destilaciones.
6. Aprender de forma autónoma.
7. Comunicarse de forma oral y escrita en la lengua nativa.
8. Definir con bases entrópicas la espontaneidad de un proceso.
9. Demostrar iniciativa y espíritu emprendedor.
10. Demostrar motivación por la calidad.
11. Entender como la presencia de soluto afecta las propiedades de las disoluciones.
12. Enumerar y describir las bases de la termodinámica estadística.
13. Explicar la cinética química.
14. Explicar los principios de termodinámica clásica y sus aplicaciones en química.
15. Gestionar la organización y planificación de tareas.
16. Gestionar, analizar y sintetizar información.
17. Identificar las denominaciones inglesas de las variables fisicoquímicas fundamentales.
18. Interpretar la evolución de la concentración de las especies con el tiempo y su relación con el mecanismo de la reacción.
19. Interpretar los comportamientos moleculares y los fenómenos de equilibrio y en gases ideales.
20. Mantener un compromiso ético.
21. Obtener información, incluyendo la utilización de medios telemáticos.
22. Operar con un cierto grado de autonomía e integrarse en poco tiempo en el ambiente de trabajo.
23. Poseer destreza para el cálculo numérico.
24. Proponer ideas y soluciones creativas.
25. Razonar de forma crítica.
26. Reconocer en procesos naturales o industriales los fenómenos de intercambios de energía y la leyes que los gobiernan.
27. Relacionar propiedades macroscópicas y propiedades de átomos y moléculas individuales.
28. Relacionar un modelo teórico con los fenómenos de equilibrios químicos.
29. Resolver problemas de forma cuantitativa en química de superficies, cinética química y electroquímica.
30. Resolver problemas y tomar decisiones.
31. Utilizar la informática para el tratamiento y presentación de información.
32. Utilizar las denominaciones inglesas de los diferentes estados de la materia y de sus cambios.
33. Utilizar los conceptos y formulaciones de los potenciales químicos y electroquímicos en procesos reales.

Contenido

1. Equilibrio material, energía de Gibbs y potencial químico
2. Equilibrio de fases en sistemas de un componente
3. Disoluciones
4. Introducción a la termodinámica estadística
5. Propiedades termodinámicas del gas ideal
6. Interpretación molecular del equilibrio químico
7. Introducción a la cinética química
8. Mecanismos de reacción
9. Teoría del Estado de Transición

Metodología

Actividades dirigidas:

Clases teóricas, clases de problemas, prácticas de laboratorio

Actividades Autónomas:

Estudio, resolución de problemas, lecturas y obtención de información, preparación de las prácticas, búsqueda bibliográfica.

Por orden de la Vicerrectora de Calidad y Acreditación Académica, las guías docentes indicarán que el docente deberá destinar aproximadamente 15 minutos de alguna clase para que sus alumnos puedan responder las encuestas de evaluación de la docencia y evaluación de la asignatura o módulo.

Nota: se reservarán 15 minutos de una clase dentro del calendario establecido por el centro o por la titulación para que el alumnado rellene las encuestas de evaluación de la actuación del profesorado y de evaluación de la asignatura o módulo.

Actividades

Título	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
Tipo: Dirigidas			
Clases de problemas	13	0,52	2, 3, 4, 15, 16, 21, 25, 29, 30, 23, 33, 31
Clases teóricas	33	1,32	2, 3, 5, 7, 8, 11, 12, 13, 15, 17, 19, 18, 27, 28, 30, 32
Prácticas de laboratorio	16	0,64	1, 5, 6, 9, 10, 11, 16, 20, 21, 22, 24, 25, 30, 31
Tipo: Autónomas			
Trabajo personal	65	2,6	1, 4, 6, 8, 9, 12, 14, 13, 15, 16, 19, 20, 21, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 33, 31

Evaluación

Evaluación

Exámenes escritos: Se realizarán dos exámenes parciales a lo largo del curso, en las fechas fijadas por la coordinación. Cada uno de estos exámenes tendrá un peso del 35% sobre la nota final. Para poder hacer la media con el resto de actividades de evaluación, la nota mínima de cada examen parcial tiene que ser de 4,0. Si no se llega a estos mínimos, al final del curso se podrá realizar un examen de recuperación del contenido de toda la asignatura. Solo se podrán presentar al examen de recuperación aquellos alumnos que no hayan conseguido la nota mínima de los exámenes parciales y para participar en la recuperación, el alumno debe

haber sido previamente evaluado en un conjunto de actividades el peso de las cuales debe equivaler a un mínimo de dos terceras partes de la calificación total de la asignatura o módulo. Por lo tanto, el alumnado obtendrá la calificación de "No Evaluable" cuando las actividades de evaluación realizadas tengan una ponderación inferior al 67% en la calificación final.

Prácticas de laboratorio: Las prácticas de laboratorio se evaluarán a partir de los resultados obtenidos en cada práctica y de un cuestionario que se deberá responder la última sesión de prácticas. La nota media obtenida de las prácticas en el laboratorio equivaldrá al 15% de la nota final de la asignatura.

Trabajo Individual: A lo largo del curso se propondrán varios ejercicios evaluables para resolver en el aula o fuera de ella. Las notas obtenidas en estos ejercicios tendrán un peso del 15% sobre la calificación final de la asignatura.

Los requisitos para superar la asignatura son:

- 1) La nota de cada examen parcial debe ser igual o superior a 4,0. La nota mínima del examen de recuperación debe ser 4,0.
- 2) La nota media de la asignatura debe ser igual o superior a 5,0.
- 3) La asistencia a las sesiones de prácticas de laboratorio es obligatoria.

Actividades de evaluación

Título	Peso	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
Exámenes	70	10	0,4	2, 3, 5, 4, 7, 8, 11, 12, 14, 13, 19, 18, 25, 26, 27, 28, 29, 33
Prácticas de laboratorio	16	8	0,32	2, 3, 6, 15, 16, 20, 21, 22, 24, 25, 30, 23, 31
Trabajo individual	15	5	0,2	1, 2, 3, 5, 4, 6, 8, 9, 10, 11, 12, 14, 13, 16, 17, 19, 18, 21, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 23, 33, 31, 32

Bibliografía

Libros disponibles en la Biblioteca de Ciència i Tecnología (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
Fisicoquímica 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

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

Software

Para las prácticas computacionales se utilizarán los siguientes programas:

Gaussview 6.0.16

Gaussian 16, B.01