

Titulació	Tipus	Curs
2502444 Química	OB	3

Professor/a de contacte

Nom: Jose Antonio Ayllon Esteve

Correu electrònic: joseantonio.ayllon@uab.cat

Equip docent

Jose Peral Perez

Jose Antonio Ayllon Esteve

Idiomes dels grups

Podeu consultar aquesta informació al [final](#) del document.

Prerequisits

Es recomenable haver cursat "Fonaments de Química", "Química Quàntica" i "Termodinàmica i Cinètica"

Objectius

L'estudiant continua avançant en la seva formació en Química Física amb la finalitat de completar la seva formació en aquesta matèria. Després de l'aproximació microscòpica a Química Quàntica i de l'aproximació macroscòpica a Termodinàmica i Cinètica (amb breus apunts microscòpics), en aquesta assignatura -com el títol indica- s'estudiaran els Fenòmens de Transport i els Fenòmens de Superfície. La Teoria Cinètica dels Gasos ens servirà de base per a l'estudi dels fenòmens de transport en fase gas. Tot seguit, l'estudi de les dissolucions d'electròlits ens permet abordar els fenòmens de transport en fase líquida. Pel que fa als fenòmens de superfície, ens centrarem en els que tenen lloc a les interfases líquid-gas, sòlid-líquid i sòlid-gas. S'utilitzaran els coneixements en Termodinàmica i Cinètica per abordar-los, amb un èmfasi especial en l'estudi de l'adsorció, tant en interfases gas-sòlid com dissolució-sòlid, i de la Catàlisi Heterogènia. L'electroquímica, que també es pot visualitzar com a fenomen de superfície, s'estudiarà des d'un punt de vista termodinàmic i cinètic. El curs finalitzarà amb la introducció dels col·loides i les macromolècules des del punt de vista de la Química Física.

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 processos d'adsorció en superfícies i ajust amb les diferents isoterms.
3. Aprendre de manera autònoma.
4. Classificar i analitzar les propietats dels col·loides i les macromolècules.
5. Comunicar-se oralment i per escrit en la llengua pròpia.
6. Definir els col·loides i les macromolècules.
7. Definir la química de superfícies.
8. Demostrar iniciativa i esperit emprenedor.
9. Demostrar motivació per la qualitat.
10. Descriure els components de l'electroquímica.
11. Gestionar l'organització i la planificació de tasques.
12. Gestionar, analitzar i sintetitzar informació.
13. Identificar els fenòmens de transport.
14. Identificar les denominacions angleses de les variables fisicoquímiques fonamentals.
15. Interpretar les dades referents a la tensió superficial (tensioactius), mullabilitat (angles de contacte) i detergència.
16. Interpretar les gràfiques d'intensitat/potencial (I/E) i la seva relació amb el funcionament de les piles.
17. Mantenir un compromís ètic.
18. Mostrar sensibilitat en qüestions mediambientals.
19. Obtenir informació, incloent-hi la utilització de mitjans telemàtics.
20. Operar amb un cert grau d'autonomia i integrar-se en poc temps en l'ambient de treball.
21. Proposar idees i solucions creatives.
22. Raonar de forma crítica.
23. Reconèixer i analitzar problemes relacionats amb la química de superfícies (adherència i detergència).
24. Reconèixer, analitzar i resoldre problemes electroquímics (piles).
25. Relacionar propietats macroscòpiques i propietats d'àtoms i molècules individuals.
26. Resoldre problemes de forma qualitativa en fenòmens de transport, col·loides i macromolècules.
27. Resoldre problemes de forma quantitativa en química de superfícies, cinètica química i electroquímica.
28. Resoldre problemes i prendre decisions.
29. Tenir destresa per al càlcul numèric.

30. Utilitzar la informàtica per al tractament i presentació d'informació.
31. Utilitzar les denominacions angleses dels diferents estats de la matèria i dels seus canvis.

Continguts

Tema 1. Gasos.

Gasos Reals: característiques generals i desviacions de la idealitat. Factor de compressibilitat. Equacions d'estat de virial i de van der Waals. Fugacitat i constants d'equilibri per a gasos reals.

Tema 2. Teoria cinètica dels gasos

Interpretació molecular de la pressió d'un gas. Distribució de Maxwell-Boltzmann de velocitats Velocitat més probable, velocitat mitjana i velocitat quadràtica mitjana. Freqüència de col·lisió i recorregut lliure mitjà. Col·lisions amb les parets. Efusió.

Tema 3. Introducció al transport. Aspectes generals i transport en fase gas.

Fenòmens de transport: fluxos i gradients. Transport en fase gas: difusió, conductivitat tèrmica i viscositat.

Tema 4. Dissolucions d'electròlits.

Interaccions ió-dissolvent. Entalpia i entropia de solvatació. Potencial químic d'electròlits. Coeficients d'activitat iònics mitjans. Interaccions ió-íó: Model de Debye-Hückel. Associació iònica.

Tema 5. Transport en dissolució.

Difusió d'espècies dissoltes. Desplaçament quadràtic mitjà.

Conductivitat i conductivitat molar. Classificació dels electròlits. Mobilitat iònica. Número de transport. Difusió i conductivitat.

Tema 6. Interfases. Aspectes generals. Interfases fluid/fluid.

Definició de interfície. Interfases corbes: tensió superficial. Mesura experimental de la tensió superficial. Angle de contacte. Mullabilitat. Pressió de vapor en superfícies corbes: equació de Kelvin. Isoterma de Gibbs.

Tema 7. Adsorció.

Adsorció física i adsorció química. Isothermes d'adsorció. Entàlpia d'adsorció Isoterma de Langmuir. Isoterma BET. Caracterització de materials porosos. Interfases carregades. Models de doble capa.

Tema 8. Catàlisi.

Mecanisme general de la catàlisi. Catàlisi homogènia. Catàlisi àcid-base.

Mecanisme general de la catàlisi heterogènia. Característiques dels catalitzadors sòlids. Mecanismes de Langmuir-Hinshelwood i Eley-Rideal.

Tema 9. Equilibri electroquímic.

Potencial electroquímic. Equació de Nernst. Notació de les cèl·lules galvàniques. Potencials normals d'elèctrode. Tipus de cèl·lules galvàniques. Obtenció de dades termodinàmiques a partir de la mesura de la FEM d'una cèl·lula galvànica.

Tema 10. Cinètica electròdica.

Sobrepotencial. Densitat de corrent d'intercanvi. Cinètica de la transferència de càrrega. Aproximacions de l'equació de Butler-Volmer. Elèctrodes polaritzables i no polaritzables. Efecte del transport de matèria.

Tema 11. Propietats col·ligatives.

Descens del punt de congelació i augment del punt d'ebullició. Pressió osmòtica.

Tema 12. Col·loides i macromolècules.

Col·loides: classificació, estructura i estabilitat. Aplicacions. Tècniques de caracterització de macromolècules i col·loides en dissolució.

Activitats formatives i Metodologia

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Tipus: Dirigides			
Classes Teòriques	37	1,48	2, 4, 7, 10, 13, 15, 16, 25
Classes de Problemes	12	0,48	2, 14, 16, 23, 24, 26, 27, 31
Tipus: Supervisades			
Estudi. Resolució de Problemes. Lectures i Obtenció d'informació	87	3,48	1, 17, 5, 29, 3, 11, 12, 19, 20, 21, 22, 28, 8, 9, 18, 30

L'adquisició dels coneixements es realitzarà mitjançant l'ús de classes teòriques i de problemes.

Classes teòriques (magistral a pissarra amb ajuda de mitjans audiovisuals) en què s'introduiran els conceptes bàsics per poder comprendre els aspectes fonamentals i aplicats de l'assignatura.

Classes de problemes (amb més participació de l'alumnat) en què s'indicarà la metodologia per resoldre quantitativament qüestions numèriques.

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.

Avaluació

Activitats d'avaluació continuada

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Examen Parcial 1	25%	3	0,12	2, 5, 7, 29, 14, 13, 15, 3, 11, 20, 21, 22, 23, 25, 28, 26, 27, 8, 18, 31
Examen Parcial 2	25%	3	0,12	17, 4, 5, 6, 10, 29, 14, 16, 11, 12, 20, 21, 22, 24, 25, 28, 26, 27, 8, 9, 31
Examen Recuperació	50%	2	0,08	2, 4, 5, 6, 7, 10, 29, 14, 13, 15, 16, 11, 12, 20, 22, 23, 24, 25, 28, 26, 27, 8, 9, 31

Treball d'aula	50%	6	0,24	1, 2, 17, 5, 29, 14, 13, 15, 16, 3, 11, 12, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 28, 26, 27, 8, 9, 18, 30, 31
----------------	-----	---	------	------------------------------------------------------------------------------------------------------

Avaluació continuada

Exàmens: Al llarg del curs es realitzaran dos exàmens parcials (P1 i P2). Tots els exàmens puntuaran amb una nota entre 0 i 10.

Treball de Seguiment: Al llarg del curs es realitzaran una sèrie de proves de seguiment. El conjunt de les proves corresponen a cada parcial S1 i S2 tindrà una nota entre 0 i 10. La prova de seguiment no es repetirà per absència de l'estudiant si aquesta no està justificada documentalment de forma vàlida (volant mèdic oficial,...)

Qualificacions: Per superar l'assignatura per curs s'ha d'obtenir una nota final de curs (NFC) major o igual a 5,0 i assolir una nota major o igual a 3,5 a cadascun dels exàmens parcials. Les proves de seguiment (S) tindran un pes del 20% i la nota de l'examen parcial (P) un 80%

$$NFC = (0,1 S1 + 0,4 P1) + (0,1 S2 + 0,4 P2) = 0,1 (S1 + S2) + 0,4 (P1 + P2)$$

Alumnes que no superin l'assignatura per curs (avaluació continuada) i alumnes que vulguin millorar la nota de curs

El alumnat que no superin l'assignatura per curs, d'acord amb l'esquema d'avaluació continuada anterior o que vulguin millorar la seva qualificació podran presentar-se al dos exàmens de recuperació dels parcials P1 i P2.

Per participar a la recuperació, l'alumnat ha d'haver participat prèviament a les dues proves escrites i el 75% del treballs d'aula

Quan el estudiant es presenti a un examen de recuperació, la nota P_i serà la de l'examen de recuperació, si aquesta és major que l'obtinguda en l'examen corresponent durant el curs. Si la nota obtinguda en l'examen de recuperació és inferior a la obtinguda durant el curs, la nota P_i serà la mitjana de la nota de recuperació i de l'examen realitzat durant el curs. Les notes de seguiment S no són recuperables.

Per superar l'assignatura amb la recuperació, el estudiant haurà de complir els mateixos requisits que per superar l'assignatura per curs.

Si l'estudiant/a ha estat avaluat només d'un 25% o menys de les proves, la qualificació final serà NO AVALUABLE.

Avaluació única

Exàmens: Una prova final que consistirà en un examen de tot el temari de l'assignatura a realitzar el dia en què els estudiants de l'avaluació continua fan l'examen del segon parcial, P2. El examen puntuarà amb una nota entre 0 i 10.

Qualificacions:

La qualificació de l'estudiant serà la nota d'aquesta prova. Per superar l'assignatura per curs s'ha d'obtenir una nota major o igual a 5,0.

Alumnes que no superin l'assignatura per curs.

Si la nota final no arriba a 5,0 l'estudiant té una altra oportunitat de superar l'assignatura mitjançant l'examen de recuperació.

La qualificació de l'estudiant serà la nota d'aquesta prova.

Per superar l'assignatura amb la recuperació, el estudiant haurà de complir els mateixos requisits que per superar l'assignatura per curs.

Bibliografia

Bibliografía más relevante

Química Física, Atkins, Peter; De Paula, Julio. 8ª ed. 2008. Ed. Médica Panamericana.

https://bibcercador.uab.cat/permalink/34CSUC_UAB/avjcb/alma991009090709706709

Disponible en línea, bibliotecas UAB

Principios de Físicoquímica. Levine, Ira N. 6ª ed. 2014. Ed. McGraw-Hill.

https://bibcercador.uab.cat/permalink/34CSUC_UAB/avjcb/alma991005053439706709

Química Física, Engel, T., Reid, P., Ed. 2006, Pearson

https://bibcercador.uab.cat/permalink/34CSUC_UAB/1eqfv2p/alma991009163779706709

Interfacial Science: an introduction (2^{on} ed.), G.T. Barnes, G.T.; Gentle, I.R. 2010 Oxford University Press, ISBN 978-0-19-657118-5

https://bibcercador.uab.cat/permalink/34CSUC_UAB/1eqfv2p/alma991003060169706709

Bibliografía complementaria

Problemas de físico química. Levine, Ira N. McGraw-Hill, 2005.

https://bibcercador.uab.cat/permalink/34CSUC_UAB/avjcb/alma991004898919706709

Physics and Chemistry of Interfaces. Butt, H.-J. K.; Kappl Graf, M., , 2003 WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. ISBN 3-527-40413-9.

https://bibcercador.uab.cat/permalink/34CSUC_UAB/avjcb/alma991010342940306709

Disponible en línea, bibliotecas UAB

Fundamentals of chemical reaction engineering. Chapter 5 Davis, Mark E. and Davis, Robert J. -

Heterogeneous Catalysis-. McGraw-Hill Higher Education, New York. (2003).

<https://authors.library.caltech.edu/records/arr0q-97509>

Disponible en línea, lliure

Programari

No s'utilitza cap programari especial

Llista d'idiomes

Nom	Grup	Idioma	Semestre	Torn
(PAUL) Pràctiques d'aula	1	Espanyol	primer quadrimestre	matí-mixt
(PAUL) Pràctiques d'aula	2	Espanyol	primer quadrimestre	tarda
(TE) Teoria	1	Català	primer quadrimestre	matí-mixt
(TE) Teoria	2	Espanyol	primer quadrimestre	tarda