



Identificació de l'assignatura

Assignatura	21418 - Química Física III
Crèdits	5 de presencials (125 hores) 1 de no presencials (25 hores) 6 de totals (150 hores).
Grup	Grup 1, 1S, GQUI (Campus Extens)
Període d'impartició	Primer semestre
Idioma d'impartició	Català

Professors

Professor/a	Horari d'atenció als alumnes					
	Hora d'inici	Hora de fi	Dia	Data d'inici	Data de fi	Despatx
Francisco Muñoz Izquierdo paco.munoz@uib.es	12:00h	13:00h	Dilluns	22/09/2014	29/05/2015	QF-102

Contextualització

L'assignatura de Química Física III està dedicada a la Cinètica Química i als Fenòmens de Transport.

És una assignatura teòrica de 6 crèdits ECTS de caràcter obligatori i programada en el primer trimestre de tercer curs del grau de Química. L'assignatura està donada d'alta a Campus Extens i es faran servir totes les facilitats docents de l'eina. Així mateix a Campus Extens es podrà trobar tot el material docent de l'assignatura.

S'impartiran tots els conceptes de la Cinètica Química: Cinètica Formal, Cinètica Molecular, Dinàmica Molecular i Catàlisi homogènea i heterogènia. Així mateix s'estudiaran els fenòmens de transport d'interès químic, com ara conductivitat tèrmica i electrolítica, viscositat, difusió i sedimentació, així com els processos electroquímics en els elèctrodes.

Aquesta assignatura, juntament amb Química Física I i II, completa la docència teòrica obligatòria dedicada a la Química-Física, per la qual cosa és convenient haver cursat anteriorment aquestes dues assignatures.

Requisits

L'assignatura té un caràcter de formació teòrica bàsica en el grau de Química.

Recomanables

Haver cursat i aprovat les assignatures de Química Física I i II

Competències





L'assignatura contribuirà a l'adquisició de les competències enumerades darrere, que formen part del conjunt de competències del grau de Química.

Específiques

- * CE2-C. Conocimiento de los principios físico-químicos fundamentales que rigen a la Química y sus relaciones entre áreas de la Química.
- * CE4-C. Conocimiento de los procesos de medida en Química para extraer información (bio)química de calidad sobre objetos naturales y artificiales.
- * CE7-C. Conocimiento de los principios matemáticos y físicos básicos necesarios para la Química.
- * CE3-C. Conocimiento de los principales elementos y compuestos orgánicos e inorgánicos, así como biomoléculas, sus rutas sintéticas y su caracterización..

Genèriques

- * CB-1. Demostrar poseer y comprender conocimientos en el área de la Química a partir de la base de la educación secundaria general, a un nivel que, si bien se apoya en libros de texto avanzados, incluye también algunos aspectos que implican conocimientos procedentes de la vanguardia en el estudio de la Química.
- * CB-2. Saber aplicar los conocimientos químicos a su trabajo o vocación de una forma profesional y poseer las competencias que suelen demostrarse por medio de la elaboración y defensa de argumentos y la resolución de problemas dentro del área de la Química.

Transversals

- * CT-3. Capacidad para la gestión de datos y la generación de información/conocimiento (uso eficaz y eficiente de las TICs y otros recursos).
- * CT-4. Capacidades de gestión/dirección eficaces y eficientes: espíritu emprendedor, iniciativa, creatividad, organización, planificación, control, toma de decisiones y negociación..

Bàsiques

- * Podeu consultar les competències bàsiques que l'estudiant ha d'haver assolit en acabar el grau a l'adreça següent: http://estudis.uib.cat/ca/grau/comp_basiques/

Continguts

En aquest apartat s'especifiquen els continguts de l'assignatura.

Continguts temàtics

Tema 1. Introducció a la Cinètica Química

- * Definicions
- * Mètodes per determinar l'ordre de reacció
- * Influència de la temperatura. Llei d'Arrhenius
- * Constant d'equilibri cinètica

Tema 2. Cinètica Formal

- * Equacions cinètiques integrades
- * Reaccions oposades
- * Reaccions paral·leles o simultànies
- * Reaccions consecutives

Tema 3. Reaccions Complexes

- * Reaccions amb radicals



- * Cinètica enzimàtica
- * Autocatàlisi i reaccions oscil·lants
- * Fotoquímica
- * Paràmetres d'Arrhenius de reaccions complexes

Tema 4. Mètodes experimentals en Cinètica Química

- * Introducció
- * Iniciació
- * Determinació de concentracions
- * Metodologia en cinètiques ràpides

Tema 5. Cinètica Molecular. Teoria de Col·lisions per reaccions bimoleculars

- * Teoria cinètica dels gasos
- * Teoria de Col·lisions

Tema 6. Cinètica Molecular. La Teoria de l'Estat Estacionari de Transició per reaccions bimoleculars

- * Funció de partició
- * Teoria de l'Estat de Transició (TET) o del Complex Activat (TCA)
- * Aplicació de la TET a reaccions
- * Efecte cinètic isotòpic
- * Millores en la TET
- * Formulació termodinàmica de la TET

Tema 7. Cinètica Molecular. Reaccions unimoleculars

- * Introducció
- * Mecanisme de Lindemann
- * Tractament de Hinshelwood
- * Tractaments estadístics

Tema 8. Dinàmica Molecular de les reaccions químiques

- * Introducció
- * Superfícies d'Energia Potencial (PES)
- * Mètodes experimentals per l'estudi de la dinàmica de les reaccions
- * Exemples de PES
- * Espectroscòpia de l'estat de transició. Femtoquímica

Tema 9. Cinètica de les Reaccions en Dissolució

- * Introducció
- * Formació de parells reactius
- * Reaccions controlades per difusió
- * Reaccions controlades per reactivitat
- * Efecte de la força iònica en reaccions entre ions
- * Aplicació de la TET a reaccions en dissolució

Tema 10. Catàlisi homogènia

- * Conceptes bàsics
- * Mecanisme general de catàlisi
- * Catàlisi àcid-base
- * Catàlisi enzimàtica
- * Autocatàlisi i reaccions oscil·lants

Tema 11. Catàlisi heterogènia

- * Interfase sòlid-gas
- * Adsorció i catàlisi
- * Mecanisme de reaccions heterogènies
- * Mecanisme molecular de la catàlisi heterogènia
- * Exemples de catàlisi heterogènia
- * Dinàmica de les reaccions gas-superfície



Tema 12. Fenòmens de transport

- * Introducció
- * Transport de massa. Difusió
- * Conductivitat tèrmica.
- * Viscositat.
- * Sedimentació i centrifugació
- * Conductivitat iònica

Metodologia docent

En aquest apartat es detallen les activitats de treball presencial i no presencial previstes en l'assignatura amb l'objectiu de desenvolupar les competències establertes anteriorment.

Per afavorir el treball personal de l'alumne l'assignatura forma part del projecte Campus Extens.

Volum de treball

A la següent taula es mostra la distribució d'hores per a les diferents activitats de treball presencial i no presencial i el seu equivalent en crèdits ECTS (1 crèdit ECTS = 25 hores de treball per l'estudiant)

Activitats de treball presencial

Modalitat	Nom	Tip. agr.	Descripció	Hores
Classes teòriques	Classes magistrals	Grup gran (G)	En aquestes sessions el professor establirà les bases teòriques de l'assignatura i la seva aplicació a casos concrets.	100
Seminaris i tallers	Seminaris	Grup mitjà (M)	En aquests seminaris s'han d'aplicar els coneixements teòrics a problemes reals químics.	25

A començament del semestre hi haurà a disposició dels estudiants el cronograma de l'assignatura a través de la plataforma UIBdigital. Aquest cronograma inclourà almenys les dates en què es faran les proves d'avaluació contínua i les dates de lliurament dels treballs. A més, el professor o la professora informará els estudiants si el pla de treball de l'assignatura es durà a terme a través del cronograma o per una altra via, inclosa la plataforma Campus Extens.

Activitats de treball no presencial

Modalitat	Nom	Descripció	Hores
Estudi i treball autònom individual	Autoavaluacions	S'haurà de fer una sèrie d'exercicis d'autoavaluació mitjançant l'eina de Campus Extens.	15
Estudi i treball autònom en grup	Treballs	S'haurà de fer una sèrie de treballs addicionals proposats pel professor de l'assignatura.	10



Riscs específics i mesures de protecció

Les activitats d'aprenentatge d'aquesta assignatura no comporten riscos específics per a la seguretat i salut dels alumnes i, per tant, no cal adoptar mesures de protecció especials.

Avaluació de l'aprenentatge dels estudiants

L'assistència és obligatòria almenys al 80% de les activitats presencials programades.

És obligatori la realització dels exercicis d'autoavaluació i treballs addicionals proposats pel professor de l'assignatura.

Per aprovar l'assignatura s'ha d'aconseguir com a mínim un 30% de la nota màxima de cadascun dels apartats que es tindran en compte en l'avaluació de l'assignatura.

L'aprobat s'obté amb una nota global igual o superior a cinc.

Classes magistrals

Modalitat	Classes teòriques
Tècnica	Proves objectives (recuperable)
Descripció	En aquestes sessions el professor establirà les bases teòriques de l'assignatura i la seva aplicació a casos concrets.
Criteris d'avaluació	Realització d'exàmens per avaluar els coneixements, habilitats i competències adquirides per l'alumnat.

Percentatge de la qualificació final: 85%

Seminaris

Modalitat	Seminaris i tallers
Tècnica	Tècniques d'observació (recuperable)
Descripció	En aquests seminaris s'han d'aplicar els coneixements teòrics a problemes reals químics.
Criteris d'avaluació	S'avaluarà el treball desenvolupat en els seminaris i tallers.

Percentatge de la qualificació final: 5%

Autoavaluacions

Modalitat	Estudi i treball autònom individual
Tècnica	Sistemes d'autoavaluació (recuperable)
Descripció	S'haurà de fer una sèrie d'exercicis d'autoavaluació mitjançant l'eina de Campus Extens.
Criteris d'avaluació	S'avaluarà la realització d'una sèrie d'exercicis d'autoavaluació.

Percentatge de la qualificació final: 5%





Treballs

Modalitat	Estudi i treball autònom en grup
Tècnica	Treballs i projectes (recuperable)
Descripció	S'haurà de fer una sèrie de treballs addicionals proposats pel professor de l'assignatura.
Criteris d'avaluació	S'avaluarà la realització d'una sèrie de treballs proposats pel professor de l'assignatura.

Percentatge de la qualificació final: 5%

Recursos, bibliografia i documentació complementària

A Campus Extens ha una còpia de tot el material docent emprat en l'assignatura.

A continuació apareix un llistat de la bibliografia de l'assignatura a l'abast de l'alumnat.

Bibliografia bàsica

- * **Química Física**. P. Atkins y J. de Paula. 8ª ed. Editorial Panamericana, 2006.
- * **Química Física**. T. Engel y P. Reid. Editorial Pearson Educación, 2006.
- * **Fisicoquímica**. I.N. Levine. Editorial McGraw-Hill, 1996.
- * **Química Física I y II**. J. Bertrán y J. Núñez. Editorial Ariel, 2002.
- * **Cinética Química**. A. González Ureña. Editorial Síntesis, 2001.
- * **Cinética Química Básica y Mecanismos de Reacción**. H.E. Avery. Editorial Reverté.

Altres recursos

Recursos online:

- * <http://www.chem1.com/acad/webtext/virtualtextbook.html>. Chem1 virtual textbook. Stephen Lower, Simon Fraser University.
- * <http://www.chem1.com/acad/webtext/dynamics/index.html>. Chemical Kinetics and Dynamics. Chem1 virtual textbook. Stephen Lower.
- * <http://www.chem.ualberta.ca/~plambeck/che/struct/s050x.htm>. Chemical Kinetics and Reaction Mechanisms. Department of Chemistry. University of Alberta.
- * http://www.saskschools.ca/curr_content/chem30_05/. Chemistry 30 Resources. Saskatchewan Schools.
- * <http://www.chem.arizona.edu/~salzmanr/>. Physical Chemistry "Dynamic Text". Dr. W.R. Salzman website. Department of Chemistry. University of Arizona.
- * <http://www.idea.wsu.edu/ChemKinetics/>. Chemical Kinetics. Department of Mathematics. IDEA: Internet Differential Equation Activities. Department of Chemistry. University of Cambridge.
- * <http://www-jmg.ch.cam.ac.uk/tools/magnus/kinetic.html>. Chemistry Resources. Consecutive first step reversible reactions.
- * <http://www-jmg.ch.cam.ac.uk/tools/magnus/michmenten.html>. Chemistry Resources. Michaelis-Menten equation.
- * <http://www-teach.ch.cam.ac.uk/teach/>. Chemistry Teaching at the University of Cambridge. Part IA Chemistry. Kinetics of Chemical Reactions. 2005 version: Full Handout.
- * http://www.uniregensburg.de/Fakultaeten/nat_Fak_IV/Organische_Chemie/Didaktik/Keusch/kinetics.htm. Chemical Kinetics. Dr. P. Keusch. University of Regensburg.
- * <http://chemed.chem.purdue.edu/genchem/topicreview/bp/ch22/rate.php>. Chemical kinetics. Bodner ResearchWeb. Division of Chemical Education. University of Purdue.
- * http://www.internetchemie.info/chemistry/chemical_kinetics.htm. Resources of Chemical Kinetics. Internetchemistry.com.



Any acadèmic	2014-15
Assignatura	21418 - Química Física III
Grup	Grup 1, 1S, GQUI
Guia docent	B
Idioma	Català

- * http://www.chemlin.net/chemistry/chemical_kinetics.htm. Resources of Chemical Kinetics. Chemlin. Virtual Chemistry Library.
- * http://www.scholarpedia.org/article/Chemical_reaction_kinetics. Chemical reaction kinetics. Scholarpedia.
- * http://nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/1999/press.html. The Nobel Prize in Chemistry 1999. Dr. A. Zewail. Femtochemistry.
- * http://www.scholarpedia.org/article/Belousov-Zhabotinsky_reaction. Belousov-Zhabotinsky reaction. Scholarpedia.

