

Guia docent

Identificació de l'assignatura

Assignatura / Grup	21418 - Química Física III / 1
Titulació	Grau de Química - Tercer curs
Crèdits	6
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 / Edifici
Francisco Muñoz Izquierdo <i>Responsable</i> paco.munoz@uib.es						Cal concertar cita prèvia amb el/la professor/a per a fer una tutoria
Rodrigo Casanovas Perera rodrigo.casanovas@uib.es						Cal concertar cita prèvia amb el/la professor/a per a fer una tutoria

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 quadrimestre 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.



Guia docent

Recomanables

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

Competències

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

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)

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



Guia docent

- * 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 bimoleculares
- * Teoria cinètica dels gasos
 - * Teoria de Col·lisions
- Tema 6. Cinètica Molecular. La Teoria de l'Estat Estacionari de Transició per reaccions bimoleculares
- * 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 unimoleculares
- * 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

Guia docent

Tema 12. Fenòmens de transport

- * Introdució
- * 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 (2,4 crèdits, 60 hores)

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.	45
Seminaris i tallers	Seminaris	Grup mitjà (M)	En aquests seminaris s'han d'aplicar els coneixements teòrics a problemes reals químics.	10
Avaluació	Control parcial	Grup gran (G)	Avaluació dels continguts de l'assignatura	1.5
Avaluació	Control Final	Grup gran (G)	Avaluació dels continguts de l'assignatura	3.5

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 Aula digital.

Activitats de treball no presencial (3,6 crèdits, 90 hores)

Modalitat	Nom	Descripció	Hores
Estudi i treball autònom individual	Autoavaluacions	Exercicis d'autoavaluació mitjançant l'eina de Campus Extens.	10
Estudi i treball autònom individual	Resolució i lliurament d'exercicis	Resolució per part de l'alumnat d'un recull d'exercicis proposats pel professor	20



Guia docent

Modalitat	Nom	Descripció	Hores
Estudi i treball autònom individual	Estudi de la teoria	Estudi dels continguts de l'assignatura	60

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

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

Per aprovar l'assignatura s'ha d'aconseguir com a mínim un 4.0 de del control final i que la suma de tots els elements d'avaluació sigui igual o superior a cinc.

Frau en elements d'avaluació

D'acord amb l'article 33 del Reglament acadèmic, "amb independència del procediment disciplinari que es pugui seguir contra l'estudiant infractor, la realització demostradorament fraudulenta d'algun dels elements d'avaluació inclosos en guies docents de les assignatures comportarà, a criteri del professor, una menysvaloració en la seva qualificació que pot suposar la qualificació de «suspens 0» a l'avaluació anual de l'assignatura".

Control parcial

Modalitat	Avaluació
Tècnica	Proves objectives (no recuperable)
Descripció	Avaluació dels continguts de l'assignatura
Criteris d'avaluació	Avaluació dels continguts teòrics i numèrics de l'assignatura

Percentatge de la qualificació final: 25%

Control Final

Modalitat	Avaluació
Tècnica	Proves objectives (recuperable)
Descripció	Avaluació dels continguts de l'assignatura
Criteris d'avaluació	Avaluació dels continguts teòrics i numèrics de l'assignatura

Percentatge de la qualificació final: 45%

Guia docent

Autoavaluacions

Modalitat	Estudi i treball autònom individual
Tècnica	Proves objectives (no recuperable)
Descripció	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: 10%

Resolució i lliurament d'exercicis

Modalitat	Estudi i treball autònom individual
Tècnica	Proves objectives (no recuperable)
Descripció	Resolució per part de l'alumnat d'un recull d'exercicis proposats pel professor
Criteris d'avaluació	S'avaluarà la realització d'una sèrie d'exercicis proposats pel professor de l'assignatura.

Percentatge de la qualificació final: 20%

Recursos, bibliografia i documentació complementària

A Campus Extens hi 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, 2004.
- * **Química Física I y II**. J. Bertrán y J. Núñez. Editorial Ariel, 2002.
- * **Cinètica Química**. A. González Ureña. Editorial Síntesis, 2001.
- * **Cinètica Química Bàsica 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.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.





Guia docent

- * 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.

