

ASSIGNATURA: QUÍMICA FÍSICA MOLECULAR

MATÈRIA: Química Física

MÒDUL: Química

ESTUDIS: Grau en Química

Pàgina 1 de 5

CARACTERISTIQUES GENERALS*

Tipus: Formació bàsica, Obligatòria, Optativa

Treball de fi de grau, Pràctiques externes

Duració: Semestral

Semestre/s: 6

Número de crèdits ECTS: 5

Idioma/s: Anglès

DESCRIPCIÓ

BREU DESCRIPCIÓ I JUSTIFICACIÓ (del sentit de l'assignatura en relació als estudis. Entre 100 i 200 paraules.)

Curs en que s'amplien els coneixements de Química Física respecte dels adquirits en la corresponent assignatura troncal introductòria. Respecte de la mateixa, un canvi important és l'adopció de la perspectiva molecular per a tractar els diversos temes del curs. Les molècules i les seves interaccions constitueixen així l'eix central sobre el que es construeix i s'articula l'assignatura. Els temari comprèn les àrees de la química quàntica, la termodinàmica estadística, els col·loides i fenòmens de superfície, els processos de transport i la base molecular de la reactivitat química. L'objectiu principal del curs és portar l'alumne a un nivell funcional de competència en el reconeixement, l'ús, la pràctica i l'execució dels principis i mètodes avançats de Química Física, acostant-lo a la praxis actual d'aquesta àrea de coneixement.

COMPETÈNCIES (de l'assignatura posades en relació amb les competències preassignades en la matèria.)

- Ser capaç de comprendre coneixements avançats de Química Física per a la pràctica de les Ciències Químiques (E4, MECES-1)
- Ser capaç d'utilitzar noves tècniques i noves eines de les Ciències Químiques (E9)
- Ser capaç d'utilitzar l'anglès com a llengua estrangera (T2, MECES-4)

REQUISITS PREVIS * (mòduls, matèries, assignatures o coneixements necessaris per al seguiment de l'assignatura. Es poden fer constar assignatures que s'han d'haver cursat.)

Les competències pròpies del mòdul fonamental.

Nivell B2 d'anglès: Com que assignatures optatives s'impartiran en anglès, és necessari haver assolit aquest nivell d'aquesta llengua.

* Aquestes característiques no han de ser modificades sense l'aprovació dels òrgans responsables de les estructures acadèmiques de nivell superior (matèria, mòdul i / o pla d'estudis).

ASSIGNATURA: QUÍMICA FÍSICA MOLECULAR

MATÈRIA: Química Física

MÒDUL: Química

ESTUDIS: Grau en Química

Pàgina 2 de 5

CONTINGUTS (com a relació dels apartats que constitueixen el temari de la mateixa, fins a un detall de segon nivell.)

1.- FONAMENTS DE QUÍMICA QUÀNTICA

Antecedents històrics. Equació d'Schrödinger. Interpretació de Born. Operadors i observables. Sobreposicions i valors esperats. Principi d'incertesa. Traslació, rotació i vibració. Estructura atòmica.

2.- TERMODINÀMICA ESTADÍSTICA

Col·lectiu canònic i funció de partició canònica. Llei de distribució de Boltzmann. Contribucions traslacionals, rotacionals, vibracionals i electròniques a les propietats termodinàmiques. Sistemes reactius. Tercer principi de la termodinàmica. Forces intermoleculares. Gasos reals, líquids i sòlids

3.- TRANSPORT I REACCIÓ EN FASE GAS

Teoria Cinètica dels gasos. Distribució de Maxwell-Boltzmann. Distribució de Maxwell. Xocs amb les parets: efusió. Xocs entre molècules. Propietats de transport. Teoria de col·lisions en fase gas. Teoria de l'estat de transició.

4.- TRANSPORT I REACCIÓ EN FASES CONDENSADAES

Propietats de transport dels líquids: viscositat, convecció, difusió i sedimentació. Macromolècules en dissolució. Migració iònica i conductivitat elèctrica. Cinètica de reaccions químiques en fases condensades. Efectes de la temperatura, pressió i dissolvent. Relacions estructura-activitat.

5.- FENOMENS DE SUPERFÍCIE

Tensió superficial i adsorció: isoterma d'adsorció de Gibbs. Adsorció sobre líquids i pel·lícules superficials. Adsorció de gasos sobre sòlids. Fisorció i quimisorció. Quimisorció dissociativa. Isoterma de Langmuir. Altres isoterms. Sistemes col·loïdals: definició, classificacions i utilitat tecnològica. Preparació. Estabilitat: teoria DLVO. Destrucció. Detergents i sistemes autoagregants: micel·les, liposomes, vesícules, membranes. Nanopartícules. Microemulsions.

* Aquestes característiques no han de ser modificades sense l'aprovació dels òrgans responsables de les estructures acadèmiques de nivell superior (matèria, mòdul i / o pla d'estudis).

ASSIGNATURA: QUÍMICA FÍSICA MOLECULAR

MATÈRIA: Química Física

MÒDUL: Química

ESTUDIS: Grau en Química

Pàgina 3 de 5

METODOLOGIA

ACTIVITATS FORMATIVES * (Completar la taula relacionant activitats, càrrega de treball, en crèdits ECTS, i competències.)

Activitats formatives	Crèdits ECTS	Competències
Sessions d'exposició de conceptes	1,1	E4, T2
Sessions de resolució d'exercicis, problemes i casos	0,4	E9
Seminaris	0,2	E4, T2
activitats obligatòries despatx professor	--	--
Treball pràctic / laboratori	--	--
Presentacions	0,2	E9, T2
activitats d'estudi personal per part dels estudiants	2,75	E4, E9, T2
activitats d'avaluació (exàmens, controls de seguiment...)	0,35	E4, T2
TOTAL	5.0	

EXPLICACIÓ DE LA METODOLOGIA DIDÀCTICA (justificant els mètodes didàctics usats en relació a les competències i els continguts de l'assignatura. Entre 100 i 200 paraules.)

L'assignatura fa servir els recursos didàctics següents:

- **Sessions d'exposició de conceptes**, en les que es presenten els conceptes inclosos en el programa, recolzant-los amb projeccions, exemples d'aplicació, animacions, laboratoris virtuals i experiències de càtedra. Es promou expressament la participació i el debat entre els alumnes. Per a l'**estudi personal** es facilitaran, a través del sistema de suport a l'aprenentatge, col·leccions de problemes, documents corresponents a les sessions presencials, proves d'autoavaluació i recursos bibliogràfics.
- **Sessions de resolució de problemes** en les que s'intenta ajudar l'alumne a comprendre l'abast dels conceptes presentats en les sessions d'exposició de conceptes ja relacionar, així com a identificar, formular i resoldre problemes en l'àmbit de la Química Física Molecular. Es fa especial èmfasi en la resolució de problemes que requereixin l'anàlisi numèrica de dades.
- **Seminaris**, en els que es revisen aquells temes que presenten més dificultat d'aprenentatge i es preparen els exàmens.
- **Presentacions individuals**, amb les que es pretén que els alumnes aprenguin a comunicar-se eficaçment en anglès. Els alumnes prepararan un tema del qual realitzaran una presentació a classe de 10 min. La llista de temes de les presentacions es lliura al principi del curs. Es valora tant l'exposició del ponent com el seguiment de l'exposició per part de la resta de la classe i capacitat de formular preguntes pertinents.
- **Activitats d'avaluació**: es realitza un test al final de cada capítol i un examen final
- El calendari de totes aquestes activitats es lliura als alumnes al principi del curs.

* Aquestes característiques no han de ser modificades sense l'aprovació dels òrgans responsables de les estructures acadèmiques de nivell superior (matèria, mòdul i / o pla d'estudis).

ASSIGNATURA: QUÍMICA FÍSICA MOLECULAR

MATÈRIA: Química Física

MÒDUL: Química

ESTUDIS: Grau en Química

Pàgina 4 de 5

AVALUACIÓ

MÈTODES D'AVALUACIÓ * (Completar la taula relacionant mètodes d'avaluació, competències i pes en la qualificació de l'assignatura.)

Mètodes d'avaluació	Pes	Competències
Examen final	40%	E4, E9
Examen/s parcial/s	--	--
Activitats de seguiment	20%	E4, E9
Treballs i presentacions	30%	E4, E9, T2
Treball experimental o de camp	--	--
Projectes	--	--
Valoració de l'empresa o institució	--	--
Participació	10%	T2

RESULTATS D'APRENTATGE (Explicació de les realitzacions de l'alumne que permeten l'avaluació de competències, relacionant-los amb les competències i els mètodes d'avaluació.)

- L'alumne ha de demostrar el coneixement de temes avançats de Química Física per a la pràctica de les Ciències Químiques (→ E4, MECES-1)
- L'alumne ha de demostrar la seva capacitat per utilitzar noves tècniques i noves eines de les Ciències Químiques (→ E9)
- L'alumne ha de demostrar capacitat per utilitzar l'anglès com a llengua estrangera en la comunicació científica i professional (→ T2, MECES-4)

QUALIFICACIÓ (Explicació del sistema de còmput de la qualificació de l'assignatura.)

L'avaluació de l'assignatura considerarà les qualificacions de les Activitats de seguiment (AS), dels Treballs i presentacions (TP), de la Participació (P) i l'examen final (EF).

La qualificació de les activitats de seguiment (AS, 20% de la nota final) es calcularà com a mitjana simple de les activitats realitzades.

La qualificació dels Treballs i presentacions (TP, 30% de la nota final) correspondrà a la valoració del treball i presentació que realitzaran els alumnes a classe.

La qualificació de la participació (P, 10% de la nota final) la s'adjudica el professor en finalitzar l'assignatura tenint en compte el nivell de participació que ha tingut l'alumne en el global de les activitats de l'assignatura.

* Aquestes característiques no han de ser modificades sense l'aprovació dels òrgans responsables de les estructures acadèmiques de nivell superior (matèria, mòdul i / o pla d'estudis).

ASSIGNATURA: QUÍMICA FÍSICA MOLECULAR

MATÈRIA: Química Física

MÒDUL: Química

ESTUDIS: Grau en Química

Pàgina 5 de 5

L'examen final (EF, 40% de la nota final) té com a objectiu valorar la síntesi de l'assignatura.

La qualificació final (CF) de l'assignatura es calcularà amb la fórmula següent: $CF = 0,4 EF + 0,2 AS + 0,3 TP + 0,1 P$ sempre i quan cadascuna de les notes parcials tingui un valor igual o superior a 4. En cas contrari, la qualificació final serà la menor d'entre $(0,4 EF + 0,2 AS + 0,3 TP + 0,1 P)$ i 4.

Es manté aquest càlcul per a les convocatòries posteriors.

AVALUACIÓ DE LES COMPETÈNCIES (Definir expressions de càlcul per a cada competència en funció de les activitats d'avaluació corresponents.)

Per a l'avaluació de cada competència s'utilitzaran els següents indicadors:

Competència E4: examen final (EF) i activitats de seguiment (AS)

Competència E9: activitats de seguiment (AS) i treballs i presentacions (TP)

Competència T2: treballs i presentacions (TP)

BIBLIOGRAFIA (recomanada i accessible l'alumne.)

- Química Física, de T. Engel y P. Reid, Pearson Addison-Wesley, Madrid 2006.
- Physical Chemistry, de P.W. Atkins y J. De Paula, Oxford University Press, 8a. ed. Oxford, 2006, www.oup.com/pchem8 o su traducción Química Física de P.W. Atkins y J. De Paula, 8ª ed. Ed. Médica Panamericana (2008).
- Físicoguímica, vol.I de I.N. Levine, McGraw-Hill, 5a. ed. Madrid 2004.
- Problemas de Físicoguímica, de I.N. Levine, McGraw-Hill, 5a. ed. Madrid 2005.

HISTÒRIC DEL DOCUMENT

MODIFICACIONS ANTERIORS (Indicar data i autor/s, els més recents primer)

ÚLTIMA REVISIÓ (Indicar data i autor/s.)

9 de Febrer de 2016, Dr. Santi Nonell

* Aquestes característiques no han de ser modificades sense l'aprovació dels òrgans responsables de les estructures acadèmiques de nivell superior (matèria, mòdul i / o pla d'estudis).