



ENSENYAMENT DE FARMÀCIA

PLA D'ESTUDIS -2002 -

PLA DOCENT - CURS 2005-06

ASSIGNATURA		FÍSICA APLICADA I FÍSICOQUÍMICA I
DEPARTAMENT		FÍSICOQUÍMICA
ÀREA DE CONEIXEMENT		QUÍMICA FÍSICA
SEMESTRE DE DOCÈNCIA		1r SEMESTRE
CRÈDITS (TEÒRICS + PRÀCTICS)		6 CR (4,5 T + 1,5 P)
TIPUS		Troncal
CRÈDITS ECTS	Hores treball activitat presencial	45 h de classes de teoria 15 h de classes de problemes
	Hores treball dirigit	
	Hores aprenentatge autònom	90 h per estudi de teoria 38 h de problemes
	Hores activitats d'avaluació	4 h
	Hores totals de treball d'alumne	192 h

1. INTRODUCCIÓ

En l'evolució de les Ciències Farmacèutiques des del seu empirisme primitiu a la seva realitat actual, la Físicoquímica ha jugat un paper transcendent. La incorporació al Pla d'estudis de la Llicenciatura de Farmàcia ha contribuït sens dubte a que la formació científica dels llicenciats sigui més amplia i consistent.

En contra del caràcter fonamentalment descriptiu de les matèries junt a les que s'enquadra, en els primers cursos de la Llicenciatura, la Físicoquímica aporta els elements que permeten quantificar e interpretar els fenòmens que són l'objecte de la Química i la Biologia. És per això que s'ha erigit com un instrument de treball teòric i experimental de gran utilitat en les Ciències de la Vida en general i Farmacèutiques en particular.

La Físicoquímica fa ús de dues metodologies per al seu desenvolupament i resolució de problemes, l'estructural molecular i la formal o fenomenològica. En el primer cas s'utilitza la Mecànica Quàntica i en el segon la Termodinàmica com a mètodes instrumentals. En totes dues es troba el fonament teòric dels fenòmens químics i biològics d'interès.

En el Pla d'Estudis de la Llicenciatura de Farmàcia de la Universitat de Barcelona la matèria Física Aplicada i Físicoquímica s'expressa en dues assignatures, la *Física Aplicada i Físicoquímica I* i la *Físicoquímica II* en el primer i segon semestre d'estudis respectivament.

La Física i Físicoquímica I, assignatura que ens ocupa, es presenta com una assignatura instrumental. S'ha estructurat en tres capítols: descripció dels estats d'agregació de la matèria, termodinàmica general i equilibri de fases. Els temes de Física i Físicoquímica s'han escollit pensant en la seva adequació i conveniència per a les Ciències Farmacèutiques i els processos biològics.

2. OBJECTIUS

OBJECTIUS GENERALS

L'estudiant ha de comprendre la metodologia que s'empra per a l'estudi de la Físicoquímica. Ha de comprendre els diferents models que es presenten, saber interpretar d'altres més complexos, així com, formular-ne de nous d'interès pel seu desenvolupament professional.

Ha de saber valorar la projecció de la Físicoquímica cap a altres matèries en quant que els més diversos fenòmens resulten ser, en última instància, processos fisicoquímics. La singular rellevància que han adquirit a l'actualitat, la Bioquímica, la Tecnologia Farmacèutica, l'Anàlisi Química, la Síntesi de Fàrmacs, entre altres, no hauria estat possible sense el concurs de la Físicoquímica.

Ha de saber que la finalitat fonamental del curs de Físicoquímica és estudiar els fenòmens de caràcter químic i biològic des d'un punt de vista físic amb mètodes essencialment físics, fent ús del raonament matemàtic per tal de portar a terme el seu desenvolupament eminentment quantitatiu. Ha d'entendre la Físicoquímica com un valuós instrument de treball teòric i experimental de gran utilitat.

En quant la Físicoquímica es troba dintre del Pla d'estudis Farmàcia els seus objectius generals no poden estar deslligats dels objectius generals de l'ensenyament recollits en el document *Objectius Generals, Continguts Específics, Requisits Generals, Recomanacions i Estratègies* (aprovat en Junta de Facultat del 15 d'octubre de 1998), concretament es relacionen estretament amb: 1, 2, 4, 5a,c,d,j, 7, 8, 9 i el 12.

OBJECTIUS ESPECÍFICS

CONEIXEMENTS

- Distingir i conèixer els diferents estats de la matèria i classificar-los en funció de les seves propietats físiques.
- Conèixer les conseqüències de la conservació de la energia.
- Conèixer el model matemàtic de descripció de les transformacions de la energia.
- Conèixer i diferenciar les diferents magnituds termodinàmiques.
- Conèixer els criteris d'espontaneïtat i equilibri i diferenciar els processos reversibles i irreversibles.
- Saber aplicar els models termodinàmics als processos de transformació física de la matèria.
- Conèixer l'aplicació de la termodinàmica als diferents camps biològics i tecnològics.

HABILITATS

- Saber determinar diferents propietats físiques de la matèria.
- Saber utilitzar les taules termodinàmiques.
- Saber resoldre numèricament problemes dels diferents estats de la matèria, de termodinàmica i de les seves aplicacions i expressar-ho amb les unitats correctes.
- Saber aplicar els fonaments teòrics a la resolució de situacions reals.

3. PROGRAMA

Lliçó 0

Introducció: La Física i Físicoquímica en el context dels estudis de Farmàcia, el seu interès. Terminologia. Definicions bàsiques. Sistemes d'unitats. Anàlisi de dimensions.

BLOC 1: DESCRIPCIÓ DELS SISTEMES MATERIALS (15 h)

OBJECTIUS

L'alumne, en finalitzar el curs, ha de ser capaç de:

- Descriure els estats de la matèria i les seves propietats.
- Expressar l'equació d'estat del gas ideal i aplicar-la per preveure canvis de P, V i T.
- Definir pressió parcial d'un gas ideal i establir la seva relació amb la fracció molar en una mescla.
- Establir les diferències entre gas ideal i gas real i també interpretar el comportament P-V dels gasos en termes de factor de compressibilitat, pressió de vapor i constants crítiques.
- Interpretar el significat de llei límit.
- Expressar el model cinètic del gas ideal i saber obtenir a partir d'ell la P i la T d'un gas ideal.
- Enunciar el principi d'equipartició de l'energia.
- Descriure les forces intermoleculares en els estats condensats de la matèria i relacionar-les amb la seva distribució en el espai.
- Definir el concepte de deformació elàstica.
- Conèixer mòduls elàstics: mòdul de Young, mòdul de rigidesa i mòdul de compressibilitat.
- Comprendre el fenomen d'empenta i establir el principi d'Arquímedes.
- Conèixer l'equació de continuïtat i el teorema de Bernoulli.
- Definir el concepte de flux.
- Enunciar l'equació general pels processos de transport.
- Conèixer les quatre lleis de transport (lleis de Fick, Ohm, Fourier i Newton).
- Deducir la segona llei de Fick.
- Diferenciar entre líquids newtonians i no newtonians i establir una classificació.
- Conèixer i aplicar la llei de Poiseuille.
- Conèixer i aplicar la llei de Stokes.
- Definir el número de Reynolds com a criteri de diferenciació entre el flux dels diferents fluids.

Lliçó 1

Forces d'interacció: electrostàtiques, Van der Waals, enllaços d'hidrogen, enllaç covalent.

Estats d'agregació de la matèria: gas, líquid, sòlid, plasma, cristalls líquids.

Lliçó 2

L'estat gasós: model gas ideal, barreja de gasos, teoria cinètic-molecular, principi d'equipartició de la energia. Gasos reals, equació de Van der Waals, líquidació de gasos, constants crítiques, llei dels estats corresponents, altres equacions d'estat.

Lliçó 3

Estats condensats de la matèria. 1) Estat sòlid: estructura i propietats. Sòlids cristal·lins i sòlids amorfes. Polimorfisme. Defectes dels sòlids cristal·lins. **2)** Estat líquid: estructura i propietats.

Lliçó 4

Mecànica de sòlids i fluids. 1) Elasticitat: Llei de Hooke. Mòduls elàstics: mòdul de Young, mòdul de rigidesa i mòdul de compressibilitat. 2) Estàtica de fluids: pressió hidrostàtica, principi d'Arquímedes. 3) Dinàmica de fluids: equació de continuïtat, teorema de Bernoulli.

Lliçó 5

Processos de transport: difusió, viscositat, transport de càrrega i transport de calor. Concepte de flux. Equació general del transport. Lleis de Fick. Líquids newtonians i no newtonians. Tixotropia i reopexia Llei de Poiseuille. Número de Reynolds. Llei de Stokes.

BLOC 2: TERMODINÀMICA GENERAL

OBJECTIUS

L'alumne, en finalitzar el curs, ha de ser capaç de:

- Definir sistema, entorn i univers, sistema tancat, obert i aïllat, magnituds intensives i extensives, treball, treball d'expansió d'un gas i altres treballs, energia i calor, l'estat de un sistema, la reversibilitat termodinàmica, el concepte d'energia interna i d'entalpia, la capacitat calorífica d'un sistema, l'expansió tèrmica isobàrica i la comprensibilitat isotèrmica, les funcions de Gibbs i Helmholtz i els criteris d'espontaneïtat i d'equilibri, el canvi d'entropia per un sistema de referència, la entropia estàndard.
- Conèixer les expressions de les capacitats calorífiques a volum constant i a pressió constant, les variables termodinàmiques i les funcions d'estat, les diferents formes d'equilibri en un sistema.
- Formular el principi zero, la primera llei de termodinàmica, la segona llei de termodinàmica, la tercera llei de la termodinàmica i establir la desigualtat de Clausius i utilitzar-la per demostrar que els canvis espontanis en sistemes aïllats comporten un augment d'entropia.
- Utilitzar la relació general entre la capacitat calorífica a pressió i a volum constant.
- Calcular el canvi d'entropia del sistema, del entorn i del univers i les variacions de les funcions de Gibbs i Helmholtz en processos reversibles i irreversibles.
- Demostrar la relació entre l'intercanvi d'energia interna i el calor transferit a volum constant, la relació entre l'intercanvi d'entalpia i el calor transferit a pressió constant, i que la entropia es una funció d'estat.
- Deduir les equacions de Gibbs-Helmholtz i conèixer la seva aplicació.

Lliçó 6

Sistemes termodinàmics. Estat d'un sistema: variables termodinàmiques i funcions d'estat. Magnituds extensives i intensives. Formes d'equilibri d'un sistema: equilibri termodinàmic. Principi zero. Transformacions reversibles i irreversibles. Energia, calor, treball, treball elèctric. Primer principi: energia interna i entalpia. Capacitats calorífiques a pressió constant i a volum constant. Aplicació del primer principi al gas ideal. Calorimetria.

Lliçó 7

Transformacions espontànies: el seu caràcter irreversible. Segon principi. Entropia. Desigualtat de Clausius. Tercer principi. Valors absoluts d'entropia. Interpretació física de l'entropia. Equació de Boltzmann. Energies de Gibbs i de Helmholtz. Variacions d'aquestes funcions en processos reversibles i irreversibles. Criteris d'espontaneïtat i d'equilibri. Influència de la pressió i de la temperatura. Equacions de Gibbs-Helmholtz. Taules termodinàmiques.

BLOC 3: EQUILIBRI DE FASES (16h)

OBJECTIUS

L'alumne en finalitzar el curs ha de ser capaç de:

- Conèixer, explicar i utilitzar el mètode de les ordenades a l'origen per la determinació de magnituds molars parcials
- Conèixer l'equació de Gibbs-Duhem que relaciona els canvis en els potencials químics dels components d'un sistema
- Definir els termes fase, component i graus de llibertat d'un sistema
- Definir i aplicar la regla de las fases
- Descriure com els canvis de temperatura i pressió afecten les característiques de congelació i ebullició de sòlids, líquids i gasos
- Definir pressió de vapor i deduir i utilitzar l'equació de Clapeyron per a determinar la dependència de la pressió d'equilibri de la temperatura
- Deduir i utilitzar l'equació de Clausius-Clapeyron que relaciona la pressió de vapor amb la temperatura en equilibris sòlid-vapor o líquid-vapor
- Conèixer e interpretar el diagrama de fases de l'aigua. Compondre els conceptes d'humitat absoluta i relativa
- Deduir i saber utilitzar la Funció de Gibbs de mescla. Deduir expressions per a l'entropia i entalpia de mescla
- Aplicar la llei de Raoult per a la pressió parcial d'un gas sobre una mescla
- Explicar el significat de dissolució ideal, dissolució diluïda ideal i dissolució real
- Aplicar la llei de Henry i utilitzar-la per a deduir la solubilitat de gasos en líquids
- Definir l'activitat i el coeficient d'activitat d'un component en una mescla real i els estats estàndard del dissolvent i el solut així com, determinar coeficients d'activitat
- Explicar el que significa propietat col·ligativa
- Conèixer expressions que relacionin l'elevació del punt d'ebullició i el descens del punt de congelació d'una dissolució ideal amb la composició. Saber utilitzar-les per determinar les masses molars de solut no volàtils
- Deduir i utilitzar una expressió per a la solubilitat d'un solut que forma una dissolució diluïda
- Definir pressió osmòtica, deduir l'equació de Van't Hoff que relaciona la pressió osmòtica amb la composició i utilitzar-la per la determinació de masses moleculars de soluts no volàtils

- Construir e interpretar els diagrames de pressió de vapor per a una barreja de dos líquids volàtils així com relacionar les composicions del líquid i el seu vapor amb la pressió total i les pressions parcials del vapor
- Utilitzar la regla de la palanca per determinar, a partir del diagrama de fases, les quantitats relatives de les fases presents
- Construir i interpretar els diagrames de temperatura-composició i utilitzar-lo en el procés de destil·lació d'una mescla
- Conèixer i explicar el significat del terme azeòtrop
- Construir i interpretar diagrames de fases líquid-líquid
- Construir i interpretar diagrames de fase sòlid-líquid i definir i comprendre el significat del terme eutèctic.
- Construir diagrames de tres components utilitzant coordenades triangulars i interpretar els mateixos per a tres líquids parcialment miscibles

Lliçó 8

Components i fases d'un sistema. Magnituds molars parcials. Equacions de Gibbs-Duhem. Volum molar parcial i potencial químic. Dependència del potencial químic amb la temperatura i la pressió. Condicions d'equilibri termodinàmic. Regla de les fases de Gibbs.

Lliçó 9

Sistemes polifàsics amb un component. Diagrama de fases de l'aigua. Equació de Clapeyron. Equació de Clausius-Clapeyron. Humitat absoluta i relativa.

Lliçó 10

Sistemes monofàsics amb dos o més components. Funcions termodinàmiques de mescla. Dissolucions líquides ideals. Llei de Raoult. Dissolucions diluïdes ideals: Llei de Henry. Activitat i coeficients d'activitat. Dissolucions reals. Funcions termodinàmiques d'excés.

Lliçó 11

Propietats col·ligatives de les dissolucions. Descens de la pressió de vapor. Augment de la temperatura d'ebullició. Descens de la temperatura de congelació. Osmosi i pressió osmòtica. Aplicacions.

Lliçó 12

Sistemes polifàsics amb dos o més components. Equilibri líquid-vapor. Mescles azeotròpiques. Destil·lació. Equilibri líquid-líquid. Equilibri sòlid- líquid. Mescles eutèctiques. Corbes de refredament. Sistemes de tres components. Llei de repartiment.

4. METODOLOGIA

La Física i la Fisicoquímica proporcionen un conjunt de coneixements, però també constitueixen un sistema d'investigació que exigeix una metodologia ben definida. Pel seu caràcter experimental, el mètode d'investigació és el mètode científic, que es fonamenta en les etapes d'inducció, deducció i verificació

experimental. Per tant, aquest mètode es basa en l'observació dels fets naturals i processos experimentals que porten a formular una hipòtesi general, que haurà de ser aplicable als diferents casos particulars. Es planteja, llavors, la verificació experimental que permetrà comprovar la hipòtesi, que si es certa es convertirà en teoria. Es recullen, per tant, dos aspectes fonamentals: l'empíric, que fa referència a l'observació dels fets experimentals, i el teòric, en relació a la formulació de lleis i models teòrics.

Classes teòriques: Aquestes classes consisteixen en la presentació oral del professor d'un tema d'una duració aproximada de 50 minuts. Els fonaments de l'assignatura han de presentar-se en les classes teòriques. Tanmateix, la discussió de conceptes i qüestions serà promoguda pel professor i a instància de qualsevol alumne.

Classes pràctiques: Seran classes de problemes ja que son un complement bàsic de les classes teòriques. Es imprescindible un treball progressiu de problemes i exercicis durant el curs per assolir un coneixement sòlid dels conceptes teòrics. Aquestes classes tenen també com a objectiu conèixer les eines matemàtiques necessàries per a l'estudi de la Física i la Fisicoquímica.

5. AVALUACIÓ

L'assignatura es pot superar en primera o segona convocatòria: febrer i juny del 2006 respectivament.

Per **superar** l'assignatura en **primera convocatòria** l'alumne haurà de realitzar:

- Al llarg del semestre de docència: tres proves de 20 minuts de duració, amb 10 preguntes tipus test i un problema, la primera al finalitzar la lliçó 5 del programa, la segona al finalitzar la lliçó 7 i la tercera al finalitzar la lliçó 12. Cadascuna té una qualificació màxima del 10% de la nota final (un 5% la part del test i un altre 5% la part del problema). La data exacta de cada prova s'indicarà amb una setmana d'antelació.
- En finalitzar la docència: un examen, en un temps màxim de tres hores, en el dia marcat pel consell d'estudis que consta de:
 - 8 preguntes sobre el temari desenvolupat, es tracta de preguntes conceptuals i de raonament amb una qualificació global equivalent al 40% de la nota final. Aquest 40% es reparteix de la manera següent 2 preguntes amb una qualificació equivalent al 8% de la nota final cadascuna i 6 preguntes amb una qualificació màxima del 4% de la qualificació final cadascuna.
 - Resolució de 3 problemes amb una qualificació màxima, per cadascun, del 10% de la qualificació final.

L'assignatura es considera superada si la qualificació és igual o superior al 50% de la màxima possible (en el cas d'aquesta assignatura 50 punts dels 100 possibles).

Aquells estudiants que en primera convocatòria no assoleixen els 50 punts requerits poden superar l'assignatura en segona convocatòria.

Per **superar** l'assignatura en **segona convocatòria** l'alumne haurà de superar un examen, en un temps màxim de tres hores, de les característiques següents:

- 15 preguntes tipus test (vertader o fals) amb una qualificació global equivalent al 30% de la qualificació final (cada resposta *correcta*: suma dos punts, *equivocada*: resta un punt, *en blanc*: no suma ni resta).
- 8 preguntes sobre el temari desenvolupat, es tracta de preguntes conceptuals i de raonament amb una qualificació global equivalent al 40% de la nota final. Aquest 40% es reparteix de la manera següent 2 preguntes amb una qualificació equivalent al 8% de la nota final cadascuna i 6 preguntes amb una qualificació màxima del 4% de la qualificació final cadascuna.
- Resolució de 3 problemes amb una qualificació màxima, per cadascun, del 10% de la qualificació final.

L'assignatura es considera superada si la qualificació és igual o superior al 50% de la màxima possible (en aquest cas 50 punts dels 100 possibles)

6. BIBLIOGRAFIA I FONTS DOCUMENTALS

- Atkins, P.W: Química Física. 6ª edició. Editorial Omega, cop. Barcelona, 1999.
- Brillas, E.; Bastida, R.M.; Centelles, F. i Doménech, X.: Fonaments de termodinàmica, electroquímica i cinètica. Ed. Barcanova, Barcelona, 1992.
- Centelles, F. Et al. Fonaments d'estructura atòmica i d'enllaç químic. Ed. Barcanova. Barcelona, 1992.
- Chang Raymond: Physical Chemistry for the biosciences. University Science Books. Sausalito, 2005.
- Cromer, Alan H.: Física para las ciencias de la vida. Ed. Reverté, 2ª edición, Barcelona, 1992.
- Jou, D., Llebot, J.E. y Pérez-García, C.: Física para las ciencias de la vida. Ed. McGraw-Hill, 1986.
- Levine, I.N.: Fisicoquímica. 5ª edició. Ed. McGraw-Hill. Madrid, 2004.
- Magnituds, unitats i símbols en Química Física. Unió Internacional de Química Pura i Aplicada (IUPAC). (traducció de la 2na edició anglesa). Institut d'Estudis Catalans. Barcelona, 2004.
- Martín, Alfred: Physical Pharmacy. Lea & Febiger, 4ª edición, 1993.
- Mills, I., Cvitas, T., Homann, K., Kallay, N. and Kuchitsu, K.: Quantities, units and symbols in Physical Chemistry. Blackwell Science, 2ª edición, Oxford, 1993.
- Sanz Pedrero, P.: Fisicoquímica para Farmàcia y Biología. Ed. Masson-Salvat Medicina, Barcelona, 1992.
- Silbey, R. J. and Alberty, R. A. Physical Chemistry. 3ª edició. John Wiley & Sons, inc. New York, 2001.
- Tipler, P.A. Física para la ciencia y la tecnología. Volumen 1 y 2. 4ª edició. Editorial Reverté, S.A. Barcelona, 2001.
- Physicochemical Symbols, Terminology, and Units. URL: http://www.iupac.org/dhtml_home.html
- Nobelprize.org. URL: <http://nobelprize.org/>

7. COORDINACIÓ I PROFESSORAT

Coordinadora: Dra. Montserrat Pujol Cubells

Professorat::

GRUP	DIES /HORA	EDIFICI/ AULA	PROFESSOR	LLENGUA
M1	dl, dm, dc i dv / 8,30 h	B - 001	Dra. Montserrat Pujol	Català
M2	dl, dc, dj i dv / 11,30 h	B - 107	Dra. Marta Espina	Castellà
M3	dm, dc, dj i dv / 10,30 h	B - 002	Dr. Joan Estelrich	Català
M4	dl, dm, dc i dv / 9,30 h	B - 207	Dra. Yolanda Cajal	Català
M5	dl, dm, dc i dj / 12,30 h	A - 1	Dr. Ramón Pouplana	Català
T1	dl, dm, dc i dv / 15 h	B - 001	Dr. Josep M ^a López Dra. Marta Espina	Català / Català
T2	dm, dc, dj i dv / 16 h	B - 002	Dr. Jordi Hernández	Català
T3	dl, dc, dj i dv / 15 h	B - 107	Dra. M ^a Teresa Montero	Català