

Ficha de Unidade Curricular LEQB – A3ES

1. Caracterização da Unidade Curricular.

1.1. Designação da unidade curricular (1.000 carateres).

Química Física / Physical Chemistry

1.2. Sigla da área científica em que se insere (100 carateres).

CEE

1.3. Duração¹ (100 carateres).

Semestral

1.4. Horas de trabalho² (100 carateres).

162

1.5. Horas de contacto³ (100 carateres).

Total: 75

T: 30 TP: 30 PL: 15

1.6. ECTS (100 carateres).

6.0

1.7. Observações⁴ (1.000 carateres).

1.7. Remarks (1.000 characters).

2. Docente responsável e respetiva carga letiva na Unidade Curricular (preencher o nome completo) (1.000 carateres).

Ruben Anacoreta de Seabra Elvas Leitão (121.5 h)

3. Outros docentes e respetivas cargas letivas na unidade curricular (1.000 carateres).

Ângela Maria Pereira Martins Nunes (54 h)

4. Objetivos de aprendizagem (conhecimentos, aptidões e competências a desenvolver pelos estudantes) (1.000 carateres).

Após a aprovação na unidade curricular, o estudante deverá:

1. Conhecer os princípios do movimento molecular e iónico e as correspondentes propriedades de transporte em sistemas químicos e biológicos, analisar e interpretar a cinética de reações química e biológicas simples e complexas em termos mecanísticos, os processos de adsorção sobre materiais porosos.
2. Compreender os aspetos energéticos e estruturais de sistemas eletroquímicos em equilíbrio e a cinética dos processos de eléctrodo; relacionar propriedades macroscópicas com propriedades moleculares, em particular de macromoléculas (naturais e sintéticas), polímeros, membranas e outros materiais de interesse.
3. Integrar os conceitos básicos abordados numa perspetiva teórica e aplicada, ilustrada com exemplos reais.
4. Aplicar os conhecimentos adquiridos à resolução de questões práticas relacionadas com informação qualitativa e quantitativa.

4. Intended learning outcomes (knowledge, skills, and competences to be developed by the students) (1.000 characters).

Upon approval, the student will:

1. Know the principles of molecular and ionic motion and the corresponding transport properties in chemical and biological systems, analyze and interpret the kinetics of simple and complex chemical and biological reactions in mechanistic terms, the adsorption processes on porous materials.
2. Understand the energetic and structural aspects of electrochemical systems in equilibrium and the kinetics of electrode processes; relate macroscopic properties with molecular properties, in particular of macromolecules (natural and synthetic), polymers, membranes and other materials of interest.

3. Integrate the basic concepts covered in a theoretical and applied perspective, illustrated with real examples.
4. Apply the acquired knowledge to the resolution of practical issues related to qualitative and quantitative information.

5. Conteúdos programáticos (1.000 carateres).

1. Movimento molecular e iónico: propriedades de transporte. Bombas de efluxo. Condutividade iónica. Difusão. Transporte de moléculas através de membranas.
2. Velocidade das reações químicas. Leis cinéticas. Mecanismos. Cinética das reações complexas. Dinâmica reacional.
3. Processos em superfícies sólidas. Crescimento e estrutura de superfícies sólidas. A extensão da adsorção. Isotérmicas de adsorção. Aplicação de modelos de isotérmicas de adsorção de Langmuir e BET. Atividade catalítica de materiais porosos.
4. Equilíbrio eletroquímico. Potenciais de equilíbrio e de membrana, potencial eletroquímico. Energética eletroquímica. Tipos de células e de elétrodos.
5. Eletroquímica dinâmica: processos em elétrodos e velocidade de transferência de carga e de transferência de massa. Técnicas potencioestáticas e potenciodinâmicas. Geração de energia.
6. Macromoléculas, colóides e surfactantes. Efeitos nas propriedades físicas de soluções: viscosidade, tensão superficial, pressão osmótica.

5. Syllabus (1.000 characters).

1. Molecular and ionic movement: transport properties. Efflux pumps. Ionic conductivity. Diffusion. Transport of molecules across membranes.
2. Speed of chemical reactions. Kinetic laws. Mechanisms. Kinetics of complex reactions. Molecular reaction dynamics.
3. Processes on solid surfaces. Growth and structure of solid surfaces. The extent of adsorption. Adsorption isotherms. Application of Langmuir and BET adsorption isothermal models. Catalytic activity of porous materials.
4. Electrochemical equilibrium. Equilibrium potentials, membrane potential, electrochemical potential. Electrochemical cells. Types of electrochemical cells and electrodes.
5. Dynamic electrochemistry: electrode processes and charge transfer and mass transfer speeds. Potentiostatic and potentiodynamic techniques. Power generation.
6. Macromolecules colloids and surfactants. Effects on the physical properties of solutions: viscosity, surface tension, osmotic pressure.

6. Demonstração da coerência dos conteúdos programáticos com os objetivos de aprendizagem da unidade curricular (1.000 carateres).

O programa introduz conceitos fundamentais de Química Física promovendo também uma visão aplicada dos mesmos em linha com a natureza da Licenciatura. As sessões laboratoriais (PL) desenvolvem competências práticas sobre os capítulos mais relevantes, e incluem a aplicação dos modelos lecionados nas aulas teóricas, nomeadamente, no que concerne à condutividade iónica, adsorção e à cinética química e eletroquímica. Este é também objetivo das aulas teórico-práticas (TP) nas quais são resolvidos problemas que evidenciam as aplicações mais relevantes da matéria lecionada em cada capítulo, indo ambos de encontro aos objetivos de aprendizagem (OA) 3 e 4. Os conteúdos programáticos relacionados com o transporte molecular e iónico, a difusão, a cinética reacional e a adsorção (capítulos 1-3) visam cumprir o OA 1, enquanto os conteúdos relacionados com os processos eletroquímicos vão de encontro aos OA 2 (capítulos 4-6) dos conteúdos programáticos.

6. Evidence of the syllabus coherence with the curricular unit's intended learning outcomes (1.000 characters).

The syllabus introduces fundamental concepts of Physical Chemistry, also promoting an applied view of them in line with the nature of the taught degree. The laboratory sessions (PL) develop practical skills on the most relevant chapters and include the application of the models taught in the theoretical classes, namely, regarding ionic conductivity, adsorption and chemical and electrochemical kinetics. This is also the objective of the theoretical-practical (TP) classes in which problems are solved that highlight the most relevant applications of the subject taught in each chapter. Both are targets to accomplish the learning outcomes (LO) 3 and 4. The syllabus related with the molecular and ionic transport phenomena concepts, the diffusion, the chemical kinetics,

and the adsorption phenomena (chapters 1-3) will accomplish the targets defined on the LO 1, while the electrochemical contents and processes are addressed to fulfil the targets defined on the LO 2 (chapters 4-6 of syllabus).

7. Metodologias de ensino (avaliação incluída) (1000 carateres).

Aulas expositivas teóricas (T), interativas e com análise de problemas/discussão. Nas aulas teórico-práticas (TP) serão resolvidos exemplos de aplicação da matéria. Aulas de práticas laboratorial (PL) complementam a avaliação da UC.

As PL são de presença obrigatória, tal como a realização dos trabalhos práticos e a elaboração dos respetivos relatórios, sendo considerados elementos de avaliação pedagogicamente fundamentais com nota final TL $\geq 9,50$ valores. Discussão do (s) trabalhos quando considerado necessário.

Avaliação distribuída com exame final, sem a realização de exames parciais nas épocas de recurso e especiais.

Dois testes parciais (TE1 e TE2): TE1 e TE2 $\geq 8,00$, média simples mínima de (TE1 e TE2) $\geq 9,50$ (TE).

Cinco fichas de trabalho (FT) disponibilizadas via moodle após a leção de cada capítulo.

Exame final (EF), em alternativa a TE, EF $\geq 9,50$.

Classificação da componente teórica (T): $T=0,80(TE \text{ ou } EF)+0,20FT$, T $\geq 9,50$.

Nota Final (NF): $NF=0,70T+0,30PL$, NF $\geq 9,50$.

7. Teaching methodologies (including assessment) (1.000 characters).

Theoretical lectures (T), interactive and with analysis of problems and their discussion. In the theoretical-practical classes (TP) examples of application of the given subject will be solved. Laboratory Practice (PL) classes complement the UC assessment.

The PL are mandatory, as well as the completion the practical assignments and the preparation of the respective reports, being considered pedagogically fundamental evaluation elements to obtain approval in the UC with a final grade LW ≥ 9.50 values. Discussion of the work(s) when deemed necessary.

Distributed evaluation with final exam, without partial exams in the appeal and special periods.

Two partial written tests (WT1 and WT2): WT1 and WT2 ≥ 8.00 with simple mean of (WT1 and WT2) ≥ 9.50 (WT).

Five worksheets (FT) made available via Moodle after each chapter is taught.

FE is the final exam, alternatively to WT with FE ≥ 9.50 .

Theoretical Note (T): $T=0.80(WT \text{ or } FE)+0.20FT$, T ≥ 9.50 .

Final Mark (FM): $FM=0.70T+0.30LW$, FM ≥ 9.50 .

8. Demonstração da coerência das metodologias de ensino com os objetivos de aprendizagem da unidade curricular (3.000 carateres).

Os objetivos de aprendizagem são baseados, por um lado, na leção teórica expositiva com recurso a meios multimédia, a qual é essencial para uma cobertura compreensiva de todos os tópicos do programa e, por outro, na resolução sistemática de exercícios. Para além da bibliografia geral que consta na presente ficha, em cada tópico especializado de matéria são disponibilizados aos estudantes *handouts* e outro material de apoio à compreensão dos conteúdos e conceitos, permitindo ao estudante aplicado um acompanhamento sistemático e organizado de toda a matéria ao longo do curso. Na plataforma Moodle os estudantes encontram ainda diversos vídeos ilustrativos dos trabalhos a realizar em laboratório. Os estudantes são mobilizados desde o início do semestre para a realização de relatórios aprofundados dos trabalhos práticos, possibilitando adicionalmente o desenvolvimento das capacidades de pesquisa bibliográfica em bases de dados científicas entretanto consultadas para a realização dos mesmos.

A metodologia de ensino implementada e o modelo de avaliação são baseados na aprendizagem individual e igualmente na aprendizagem em grupo. A primeira resulta do acompanhamento e do estudo continuado das matérias lecionadas em sala de aula com o auxílio da bibliografia recomendada e de outros meios de apoio e, a segunda, das sessões de resolução de problemas e do acompanhamento laboratorial bem como da elaboração dos relatórios e da sua discussão no final do semestre. Estes dois vetores permitirão ao estudante atingir com a profundidade adequada os vários objetivos de aprendizagem definidos.

8. Evidence of the teaching methodologies coherence with the curricular unit's intended learning outcomes (3.000 characters).

The learning objectives are based on the one hand, on lecture theory using multimedia media, which is essential for a comprehensive coverage of all topics in the program, and, on the other hand, on the systematic resolution of appropriate exercises. In addition to the general bibliography contained in this sheet, in each specialized subject topic, *handouts* and other material to support the understanding of the contents and concepts are made available to the students, allowing the applied student a systematic and organized follow-up of the entire subject throughout the course. On the Moodle platform, students will also find several illustrative videos of the work to be carried out in the laboratory. Students are mobilized from the beginning of the semester to make in-depth reports of the practical work, additionally enabling the development of bibliographic research skills in scientific databases consulted in the meantime for their accomplishment.

The implemented teaching methodology and assessment model are based on individual learning and also on group learning. The first results from the monitoring and continued study of the subjects taught in the classroom with the help of the recommended bibliography and other means of support and, the second, from the problem-solving sessions and laboratory follow-up, as well as from the preparation of reports and their discussion at the end of the semester. These two vectors will allow the student to achieve the various learning objectives defined in the appropriate depth.

9. Bibliografia de consulta/existência obrigatória (1.000 carateres).

1. Atkins, P.W., & de Paula, J. (2017). *Physical Chemistry* (11th ed.). Oxford University Press.
2. Hammes, G. G., & Hammes-Schiffer, S. (2015). *Physical Chemistry for the Biological Sciences* (2nd ed.). John Willey & Sons.
3. Silbey, R.J., Alberty, R.A., Papadantonakis, G. A., & Bawendi, M.G. (2021). *Physical Chemistry* (5th ed.). John Willey & Sons.
4. Monk, P. (2004). *Physical Chemistry-understanding the chemical world* (5th ed.). John Willey & Sons.
5. Levine, I.N. (2008). *Physical Chemistry* (6th ed.). McGraw-Hill.

¹ Anual, semestral, trimestral, ...

² Número total de horas de trabalho.

³ Discriminadas por tipo de metodologia adotado (T - Ensino teórico; TP - Ensino teórico-prático; PL - Ensino prático e laboratorial; TC - Trabalho de campo; S - Seminário; E - Estágio; OT - Orientação tutorial; O - Outro).

⁴ Assinalar sempre que a unidade curricular seja optativa.