



Ministerio de Cultura y Educación
Universidad Nacional de San Luis
Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia
Departamento: Química
Area: Química Física

(Programa del año 2006)

I - Oferta Académica

Materia	Carrera	Plan	Año	Período
QUIMICA FISICA I	LIC. QUIMICA	5/04	2	2c

II - Equipo Docente

Docente	Función	Cargo	Dedicación
ZAMARBIDE, GRACIELA NIDIA	Prof. Responsable	P.TIT EXC	40 Hs
ABELLO, MARIA CRISTINA	Prof. Colaborador	P.ADJ EXC	40 Hs
MONTAÑA, MARIA PAULINA	Responsable de Práctico	JTP EXC	40 Hs
ANDRADA, MATIAS FERNANDO	Auxiliar de Práctico	A.1RA SIM	10 Hs

III - Características del Curso

Credito Horario Semanal				
Teórico/Práctico	Teóricas	Prácticas de Aula	Práct. de lab/ camp/ Resid/ PIP, etc.	Total
Hs	6 Hs	3 Hs	3 Hs	12 Hs

Tipificación	Periodo
B - Teoria con prácticas de aula y laboratorio	2 Cuatrimestre

Duración			
Desde	Hasta	Cantidad de Semanas	Cantidad de Horas
07/08/2006	10/10/2006	14	170

IV - Fundamentación

La Química-Física es una disciplina básica para el desarrollo del Plan de la Licenciatura en Química. Esta asignatura, Química-Física I, da los fundamentos fisicoquímicos teórico-prácticos que sirven de apoyatura a los cursos que le siguen (tanto de Química Analítica como de Química Orgánica, por ejemplo), en los temas específicos de la Termodinámica

V - Objetivos

El objetivo de la materia es:

- Buscar una adecuada formación epistemológica en función de los objetivos básicos de la Termodinámica.
- Explicar de qué manera la energía y sus transformaciones juegan un papel de suma importancia desde siempre, tanto en los aspectos biológicos como técnicos e industriales.
- Hacer el nexo entre sus contenidos y aquellas disciplinas que se apoyan en la Termodinámica.
- Proporcionar en lo posible a los educandos, las herramientas para un manejo técnico y teórico-práctico de problemas en el campo de la Termodinámica.

VI - Contenidos

PROGRAMA ANALITICO

TEMA 1: Gases: Leyes Empíricas. Gases Ideales. Ecuación de estado para los gases ideales. Gases Reales: Ecuación de Van der Waals. Estado Crítico y Ley de los estados correspondientes. Otras ecuaciones de estado. Teoría cinética de los gases. Presión de un gas. Energía traslacional y temperatura. Velocidad cuadrática media. Distribución de Maxwell. El principio del valor medio aplicado a velocidades y energía. Equipartición de la energía. Ley de distribución barométrica.

TEMA 2: Termodinámica. Ley cero de la termodinámica. Temperatura y termometría. Calor y Trabajo. Primera Ley de la Termodinámica. Aplicación a sistemas cerrados. Capacidad calorífica. Función entalpía. Experiencia de Joule. Relaciones entre CP y CV. Experiencia de Joule Thomson. Transformaciones politrópicas: isotérmicas, adiabáticas, isométricas e isobáricas. Termoquímica. Entalpía molar estándar. Calor de reacción. Calores de formación. Calores de combustión. Entalpías de enlace. Calores involucrados en los cambios de fase. Ecuación de Kirchoff. Termoquímica experimental.

TEMA 3: Segunda Ley de la Termodinámica. Rendimiento de las máquinas térmicas. Escala de temperatura termodinámica. Función entropía. Desigualdad de Clausius. Cambios de entropía en sistemas aislados. Combinación de Primera y Segunda Ley. Entropía estándar y tercera ley de la Termodinámica. Cambios de entropía en las reacciones químicas. Condiciones generales de equilibrio y espontaneidad. Función trabajo. Función energía libre de Gibbs. Ecuaciones fundamentales de la termodinámica y relaciones de Maxwell. Ecuación termodinámica de estado. Energía libre de los gases reales: fugacidad.

TEMA 4: Sistemas de composición variable. Propiedades molares parciales. Ecuación de Gibbs-Duhem. Potencial Químico. Actividad. Potencial químico en gases ideales puros, en mezclas de gases y mezclas líquidas. Energía libre y entropía de mezclas. Equilibrio químico en una mezcla: grado de avance. Constantes: K_a , K_p , K_c , K_f . Principio de Le Chatelier. Energía libre estándar. Variación de la constante de equilibrio con la temperatura: ecuación de Van't Hoff. Equilibrio químico entre gases y fases condensadas. Reacciones acopladas.

TEMA 5: Equilibrio entre fases. Regla de las fases. Sistema de un componente. Curvas de potencial químico vs. Temperatura. Ecuación de Clapeyron y de Clausius-Clapeyron. Sistemas de multicomponentes. Diagrama de fases para el H_2O , el CO_2 y el S. Ley de distribución de Nernst.

TEMA 6: Solución ideal. Cálculo del potencial químico en soluciones binarias ideales. Propiedades coligativas: descenso de la presión de vapor, descenso del punto de congelación, aumento de la temperatura de ebullición y presión osmótica. Soluciones con más de un componente volátil. Ley de Raoult. El potencial químico en soluciones ideales. Soluciones binarias y regla de la palanca. Cambios de estado por reducción isotérmica de la presión. Diagramas temperatura-composición. Cambios de estado por aumento de la temperatura. Destilación fraccionada. Solución ideal diluida. Ley de Henry.

TEMA 7: Equilibrio en sistemas no ideales. Actividad. Actividad y equilibrio de reacción. Actividad en soluciones electrolíticas. Teoría de Debye-Hückel sobre la estructura de soluciones iónicas diluidas. Ley límite y su extensión para soluciones más concentradas. Equilibrio en soluciones iónicas. El agua como solvente.

TEMA 8: Electroquímica. Conducción eléctrica. Leyes de Ohm. Conductancia y conductividad. Circuito conductimétrico. Conductividad equivalente. Variación de la conductividad con la temperatura. Ley de Kohlrausch.

Movilidad iónica. Ecuación de Onsager. Número de transporte. Conductividad en soluciones no acuosas. Producto iónico del agua. Producto de solubilidad. Electrodo. Pilas galvánicas. Reacciones en la celda. Trabajo eléctrico. Ecuación de Nernst. Fuerza electromotriz de una celda. Potencial normal de electrodo. Pila de Weston. Cálculo de actividades y constante de equilibrio. Variación de la fem con la temperatura. Medidas de pH. Electrodo de vidrio. Pilas de concentración.

TEMA 9: Termodinámica de los procesos irreversibles. Sistemas discontinuos con reacción química. Conservación de la masa y la energía. Velocidad de producción de entropía. Teorema de Onsager.

TEMA 10: Termodinámica estadística. Probabilidad. Microestados, macroestados y probabilidad termodinámica. Aproximación de Stirling. Modelos físicos: Maxwell-Boltzmann, Bose-Einstein y Fermi-Dirac. Distribución de equilibrio. Interpretación estadística de calor, trabajo, energía interna y entropía. La función de partición. Función de partición total. Función de partición traslacional: modelo de la partícula en un pozo de potencial. Función de partición rotacional: modelo del rotor rígido. Función de partición vibracional: modelo del oscilador armónico. Contribución de la función de partición para el cálculo de la energía interna, entropía, presión y energía libre de una molécula. Funciones de partición y capacidad calorífica. Termodinámica estadística del equilibrio químico.

PROGRAMA DE EXAMEN:

BOLILLA 1: a) Gases: Leyes Empíricas. Gases Ideales. Ecuación de estado para los gases ideales. Gases Reales: Ecuación de Van der Waals. Estado Crítico y Ley de los estados correspondientes. Otras ecuaciones de estado. Teoría cinética de los gases. Presión de un gas. b) Termodinámica estadística. Probabilidad. Microestados, macroestados y probabilidad termodinámica. Aproximación de Stirling. Modelos físicos: Maxwell-Boltzmann, Bose-Einstein y Fermi-Dirac. Distribución de equilibrio. Interpretación estadística de calor, trabajo, energía interna y entropía. La función de partición.

BOLILLA 2: a) Energía traslacional y temperatura. Velocidad cuadrática media. Distribución de Maxwell. El principio del valor medio aplicado a velocidades y energía. Equipartición de la energía. Ley de distribución barométrica. b) Función de partición total. Función de partición traslacional: modelo de la partícula en un pozo de potencial. Función de partición rotacional: modelo del rotor rígido. Función de partición vibracional: modelo del oscilador armónico. Contribución de la función de partición para el cálculo de la energía interna, entropía, presión y energía libre de una molécula. Funciones de partición y capacidad calorífica. Termodinámica estadística del equilibrio químico.

BOLILLA 3: a) Termodinámica. Ley cero de la termodinámica. Temperatura y termometría. Calor y Trabajo. Primera Ley de la Termodinámica. Aplicación a sistemas cerrados. Capacidad calorífica. Función entalpía. Experiencia de Joule. Relaciones entre CP y CV. Experiencia de Joule Thomson. b) Termodinámica de los procesos irreversibles. Sistemas discontinuos con reacción química. Conservación de la masa y la energía.

BOLILLA 4: a) Transformaciones politrópicas: isotérmicas, adiabáticas, isométricas e isobáricas. Termoquímica. Entalpía molar estándar. Calor de reacción. Calores de formación. Calores de combustión. Entalpías de enlace. Calores involucrados en los cambios de fase. Ecuación de Kirchoff. Termoquímica experimental. b) Velocidad de producción de entropía. Teorema de Onsager.

BOLILLA 5: a) Segunda Ley de la Termodinámica. Rendimiento de las máquinas térmicas. Escala de temperatura termodinámica. Función entropía. Desigualdad de Clausius. Cambios de entropía en sistemas aislados. Combinación de Primera y Segunda Ley. b) Electroquímica. Conducción eléctrica. Leyes de Ohm. Conductancia y conductividad.

Circuito conductimétrico. Conductividad equivalente. Variación de la conductividad con la temperatura. Ley de Kohlrausch. Movilidad iónica. Ecuación de Onsager. Número de transporte. Conductividad en soluciones no acuosas.

BOLILLA 6: a) Entropía estándar y tercera ley de la Termodinámica. Cambios de entropía en las reacciones químicas. Condiciones generales de equilibrio y espontaneidad. Función trabajo. Función energía libre de Gibbs. Ecuaciones fundamentales de la termodinámica y relaciones de Maxwell. Ecuación termodinámica de estado. Energía libre de los gases reales: fugacidad. b) Producto iónico del agua. Producto de solubilidad. Electrodo. Pilas galvánicas. Reacciones en la celda. Trabajo eléctrico. Ecuación de Nernst. Fuerza electromotriz de una celda. Potencial normal de electrodo. Pila de Weston. Cálculo de actividades y constante de equilibrio. Variación de la fem con la temperatura. Medidas de pH. Electrodo de vidrio. Pilas de concentración.

BOLILLA 7: a) Sistemas de composición variable. Equilibrio químico. Potencial químico en gases ideales puros y en mezclas. Energía libre y entropía de mezclas. Equilibrio en una mezcla: grado de avance. Principio de Le Chatelier. Energía libre estándar. Equilibrio químico en mezclas gaseosas ideales: K_p . Equilibrio químico en mezclas gaseosas reales. Energía libre estándar. b) Equilibrio en sistemas no ideales. Actividad. Actividad y equilibrio de reacción. Actividad en soluciones electrolíticas.

BOLILLA 8: a) Variación de la constante de equilibrio con la temperatura: ecuación de Van't Hoff. Equilibrio entre gases y fases condensadas. Reacciones acopladas. Cantidades molares parciales. Ecuación de Gibbs-Duhem. b) Teoría de Debye-Hückel sobre la estructura de soluciones iónicas diluidas. Ley límite y su extensión para soluciones más concentradas. Equilibrio en soluciones iónicas. El agua como solvente.

BOLILLA 9: a) Equilibrio entre fases. Regla de las fases. Sistema de un componente. Curvas de potencial químico vs. Temperatura. Ecuación de Clapeyron y de Clausius-Clapeyron b) Solución ideal. Cálculo del potencial químico en soluciones binarias ideales. Propiedades coligativas: descenso de la presión de vapor, descenso del punto de congelación, aumento de la temperatura de ebullición y presión osmótica.

BOLILLA 10: a) Sistemas de multicomponentes. Diagrama de fases para el H_2O , el CO_2 y el S. Ley de distribución de Nernst. b) Soluciones con más de un componente volátil. Ley de Raoult. El potencial químico en soluciones ideales. Soluciones binarias y regla de la palanca. Cambios de estado por reducción isotérmica de la presión. Diagramas temperatura-composición. Cambios de estado por aumento de la temperatura. Destilación fraccionada. Solución ideal diluida. Ley de Henry.

VII - Plan de Trabajos Prácticos

PROGRAMA DE TRABAJOS PRÁCTICOS DE LABORATORIO

- 1.- GASES y TERMODINÁMICA : determinación de la razón de capacidades caloríficas de un gas, C_p/C_v .
- 2.- PROPIEDADES MOLARES PARCIALES: determinación de los volúmenes parciales molares de soluciones de NaCl, como función de la concentración.
- 3.- CALORIMETRIA: Determinación del calor de combustión de compuestos orgánicos.
- 4.- EQUILIBRIO FÍSICO: verificación de la ley de reparto de Nernst para el sistema: I_2 (solute); H_2O y CCl_4 (solventes).
- 5.- EQUILIBRIO QUÍMICO: determinación de la constante de equilibrio para la reacción: $I_2 + KI \rightleftharpoons I_3 + K^+$, por un

método volumétrico.

6.- SOLUCIONES: determinación de la composición del azeótropo: metanol-benceno.

7.- ELECTROQUIMICA I: Conductividad; estudio comparativo de la conductividad de electrolitos fuertes (KCL) y débiles (ácido acético). Determinación de la constante de disociación.

8.- ELECTROQUIMICA II: Potencial de electrodo; determinación del potencial normal de los electrodos de Zn y Cu. Cálculos de la constante de equilibrio de la reacción: $\text{CuSO}_4 + \text{Zn} \rightarrow \text{ZnSO}_4 + \text{Cu}$ a partir de medidas de f.e.m.

9.- ELECTROQUIMICA III: Potenciometría; valoración potenciométrica de un ácido fuerte (HCl). Determinación de pH con un electrodo combinado vidrio-calomel.

10.- TERMODINAMICA II: cálculo de las propiedades termodinámicas: ΔG° , ΔH° y ΔS° a partir de mediciones de f.e.m. a distintas temperaturas (coeficiente de temperatura).

TRABAJOS PRÁCTICOS DE AULA: Resolución de 120 problemas de aplicación de los temas desarrollados en las clases teóricas.

VIII - Regimen de Aprobación

1. Cada alumno deberá cumplir con el 100% de las prácticas de laboratorio y de aula.
2. Durante el período lectivo se tomarán 4 (cuatro) exámenes parciales escritos, con pregunta conceptuales sobre los temas desarrollados hasta el momento de cada evaluación que podrán incluir la solución de algún problema de aplicación como los realizados. Las flechas de los mismos se darán a conocer con 7 (siete) días de anticipación.
3. Se ofrecerán al alumno 4 (cuatro) posibilidades de recuperación de exámenes parciales o sus equivalencias; disponiendo -dentro del crédito horario- los días destinados a las recuperaciones .
4. Se ofrecerá la posibilidad de la promoción sin examen final, a través de 1 (un) examen totalizador, a todos aquellos alumnos que hayan aprobado los 4 (cuatro) exámenes que la regularidad ordinaria establece y que además hayan cumplimentado las correlativas correspondiente.
5. Para la aprobación de un trabajo práctico, cada alumno deberá aprobar un interrogatorio sobre la tarea propuesta y deberá presentar un informe ordenado de lo realizado.
6. Los docentes responsables del curso, establecerán, oportunamente, horas de consulta en los días y horarios que convengan a la mayoría de los alumnos, para responder a las dudas que pudieran suscitarse en la realización o interpretación de la tarea propuesta.

IX - Bibliografía Básica

- [1] BIBLIOGRAFÍA: del Programa Analítico y de Examen
- [2] ·ALBERTY R.A. y DANIELS F.: Physical Chemistry, 5th Editorial. John Wiley.
- [3] ·ATKINS P.W: Physical Chemistry, Fifth Edition, Oxford University Press.
- [4] ·BARROW G. : Química Física, Vol. I y II, Editorial Reverté.
- [5] ·CASTELLAN G. : Physical Chemistry, Editorial Addison-Wesley Publishing.
- [6] ·CROW D.: Principles and Applications of Electrochemistry, Chapman and Hall.
- [7] ·EGGERS D. y Otros: Fisicoquímica. Editorial Limusa-Weley.
- [8] ·HOUGEN D. y Otros: principios de los Procesos Químicos, parte II Termodinámica. Editorial Reverté.
- [9] ·KAUZMAN W. : Propiedades Térmicas de la Materia; Vol. I. Teoría Cinética de los Gases; Vol. II Termodinámica y Estadística. Editorial Reverté.
- [10] ·FINDLAY A. : The phase rule. Diver Pub. 9th Editorial
- [11] ·GLASSTONE S. : Termodinámica para Químicos. Editorial Aguilar.
- [12] ·GROOT S. : Thermodynamics of Irreversible Processes. North Holland Plub. Co.
- [13] ·MOORE W.: Physical Chemistry. Editorial Prentice Hall.
- [14] ·SEARS F.: Termodinámica. Editorial Reverté.
- [15] ·SMITH J. : and VAN NESS C.: Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics. Mc Graw—Hill.

X - Bibliografía Complementaria

- [1] BIBLIOGRAFÍA: del Programa de Trabajos Prácticos (Aula y Laboratorio)
- [2] ·ADAMSON A.W.: Problemas de Química Física. Editorial Reverté.
- [3] ·ATKINS P.W: Physical Chemistry, Fifth Edition, Oxford University Press
- [4] ·BURMISTROVA O.A. y Otros: Prácticas de Química Física. Editorial Mir Moscú.
- [5] ·CASTELLAN G.W.: Fisicoquímica. Fondo Educativo Interamericano.
- [6] ·DANIELS, WILLIAMS y Otros: Experimental Physical Chemistry, 6th Editorial Mc. Graw-Hill Book Co.
- [7] ·LABOWITZ y ARENTS: Physical Chemistry Problems and Solutions. Academic Press.
- [8] ·PALMER W.G.: Química-Física Experiments. Editorial Pitman.
- [9] ·SHOEMAKER and GARLAND C.W.: Experimentes in Physical Chemsitry. Editorial Mc Graw-Hill.

XI - Resumen de Objetivos

El objetivo de la materia es:

- Buscar una adecuada formación epistemológica en función de los objetivos básicos de la Termodinámica.
- Explicar de qué manera la energía y sus transformaciones juegan un papel de suma importancia desde siempre, tanto en los aspectos biológicos como técnicos e industriales.
- Hacer el nexo entre sus contenidos y aquellas disciplinas que se apoyan en la Termodinámica.
- Proporcionar en lo posible a los educandos, las herramientas para un manejo técnico y teórico-práctico de problemas en el campo de la Termodinámica.

XII - Resumen del Programa

- 1.- Gases Ideales y Gases Reales.
- 2.- Teoría cinética de los gases.
- 3.- Primera Ley de la termodinámica.
- 4.- Segunda y Tercera Leyes de la Termodinámica.
- 5.- Espontaneidad y Equilibrio.
- 6.- Equilibrio Físico.
- 7.- Equilibrio Químico.
- 8.- Soluciones.
- 9.- Equilibrio en Sistemas No Ideales.
- 10.- Equilibrio Iónico.
- 11.- Conductividad.
- 12.- Celdas Electroquímicas.
- 13.- Termodinámica de los Procesos Irreversibles.
- 14.- Termodinámica Estadística.

XIII - Imprevistos