

UNIVERSIDAD NACIONAL DE RÍO CUARTO
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS, FÍSICO-QUÍMICAS Y NATURALES

DEPARTAMENTO: de Química.

CARRERA: Licenciatura en Química.

ASIGNATURA: Físicoquímica I **Código:** 2015 **Régimen:** No promocionable

Profesor Responsable: Dr.Hernán Montejano.

Cuerpo Docente: Dra. Viviana Grosso, Dr.Hernán Montejano.

Año Académico: 2018 – Segundo Cuatrimestre.

| |
|--|
| Objetivos, Metodología y Régimen Académico. |
|--|

Objetivos de la Asignatura:

En este curso se pretende que el alumno complete su formación con el conocimiento, comprensión y manejo de los conceptos de la Termodinámica, en particular sus aplicaciones químicas. Para ello, se presta particular atención al concepto de potencial químico, y su uso en la descripción del comportamiento de diferentes sistemas fisicoquímicos. La introducción de la Mecánica Cuántica tiene como finalidad la comprensión de la idea de la cuantización de la energía, y en la Mecánica Estadística se conjugan los conceptos de la descripción cuántica (teórica) de los niveles de energía con las funciones termodinámicas definidas a partir del comportamiento macroscópico de los sistemas fisicoquímicos.

Régimen Académico:

Regularidad:

Para alcanzar la condición de alumno regular, se debe aprobar en primera instancia el 80% de los trabajos prácticos de laboratorio y aprobar los exámenes parciales.

Carga Horaria:

Número de horas semanales: Teórico-Prácticos: 6 horas Trabajos Prácticos de Laboratorio: 6 horas.

Evaluaciones:

Exámenes Parciales: Se toman tres (3) exámenes parciales escritos y dos (2) recuperaciones de ser necesario.

La evaluación en exámenes parciales se complementa con el seguimiento del progreso del alumno y su nivel de comprensión mediante su participación en las sesiones teórico-prácticas y prácticos de Laboratorio. Como usualmente estos cursos son poco numerosos, es posible hacer este seguimiento personal por alumno.

Examen Final: Modalidad oral o escrita.

Programa – Teórico, Analítico y de Examen.

TEMA 1:

(a) Naturaleza atómico-molecular de la materia. Origen y naturaleza de las fuerzas intermoleculares. Estados de agregación: Gases, líquidos y sólidos. El modelo de gas ideal. Teoría Cinética del Gas Ideal. Cálculo de la Presión. Consecuencias de la Teoría Cinética: Ley de Graham. Distribución de velocidades y energía cinética: Ley de Maxwell y Boltzman. Gases Reales: Desviaciones del comportamiento ideal: Formas de expresión: Factor de compresibilidad, ecuaciones viriales y ecuaciones cúbicas de estado. Licuación de gases. Isotermas de Andrews. El punto crítico. Principio de los estados correspondientes.

(b) Termodinámica Clásica. Interacción sistema ambiente. Calor, Trabajo y Energía Interna: Primera Ley. Procesos termomecánicos (isotérmicos, isobáricos, isocóricos, adiabáticos). Función Entalpía. Efectos térmicos a presión y volumen constante: Capacidades Caloríficas. Termoquímica: Calores de formación, Energías de unión promedio y entalpías de disociación. Segunda Ley. Procesos Reversibles e irreversibles (espontáneos). La función entropía. Formulación y cálculos. Tercera Ley: Entropías absolutas.

(c) Equilibrio Termodinámico. Las funciones Trabajo y Energía Libre. Condiciones de equilibrio. Sistemas cerrados de composición constante y sistemas abiertos de composición variable. Potenciales termodinámicos. El potencial químico. Termodinámica de gases reales: fugacidad. Equilibrio entre fases. Regla de las fases de Gibbs. Sistemas de un componente. Equilibrio físico: Diagramas. Ecuaciones de Clapeyron y Clausius-Clapeyron. Sistemas de dos o más componentes: Propiedades termodinámicas de mezclas: Soluciones. Propiedades Molares parciales. Definición y Cálculo a partir de datos experimentales (Calores de mezcla y volúmenes). El potencial químico en mezclas. Las leyes empíricas de Raoult y Henry. Diagramas. Propiedades termodinámicas de mezclas. Solubilidad. Propiedades coligativas. Ecuación de Gibbs-Dühem. Ecuación de Margules Soluciones no ideales. El concepto de actividad y coeficiente de actividad, convenciones. Equilibrio Químico. Expresión de la condición de equilibrio en términos de potencial químico. La constante de equilibrio: Diversas expresiones. Dependencia de la constante de equilibrio con la presión y la temperatura. Equilibrio de reacciones de gases, en solución y en sistemas heterogéneos.

TEMA 2: Elementos de Mecánica Cuántica. Antecedentes históricos. Radiación del Cuerpo Negro. Aspectos experimentales y teorías clásicas. Ley de Wien. Ley de Desplazamiento. Ley de Stefan- Boltzmann. Hipótesis Cuántica de Planck. Efecto Fotoeléctrico. Fotones. Difracción de electrones. Ondas de materia. Hipótesis de De Broglie. Principio de Incerteza de Heisemberg. Ecuación de Schrödinger. Función de Onda: significado y propiedades generales. Partícula en Caja: funciones de onda y niveles de energía. Partícula en caja tridimensional. Degeneración. Oscilador Armónico Simple: funciones de onda y niveles de energía. Operadores en Mecánica Cuántica. Valor medio de un observable. Ortogonalidad de funciones de onda. Conmutación de operadores y su significado. Operadores de momento angular: conmutación y autovalores. Niveles de energía de un Rotor Rígido.

TEMA 3: Elementos de Mecánica Estadística. Sistemas, Conjuntos y Distribuciones. Probabilidad de una distribución. La distribución más probable. Conjuntos Microcanónico y Canónico. Distribución de Boltzmann. Función de Partición. Termodinámica Estadística. Interpretación estadística del calor y el trabajo. Entropía y probabilidad. Entropía de un gas monoatómico: Ecuación de Sackur- Tetrode. Sistemas de partículas distinguibles e indistinguibles. Cálculo de la función de partición: traslacional; rotacional y el número de simetría; vibracional y electrónica. Función de Partición y Funciones Termodinámicas. Aplicaciones. Energía promedio y el principio de equipartición. Capacidades Caloríficas. Constante de Equilibrio y funciones de partición. Cálculo estadístico de constantes de equilibrio para sistemas gaseosos.

Trabajos Prácticos de Laboratorio

Práctico N^o 1: Determinación del calor de descomposición del Peróxido de Hidrógeno en solución acuosa.

Práctico N^o 2: Determinación de calores de solución en mezclas alcohol etílico-agua.

Práctico N^o 3: Determinación de volúmenes molares parciales en mezclas agua-etanol.

Práctico N^o 4: Equilibrio heterogéneo. Solubilidad como una función de la temperatura. "Determinación del calor diferencial de solución de ácido succínico en agua a partir del equilibrio de solubilidad".

Práctico N^o 5: Presión de vapor. Agua, etanol, metanol. Micrométodo

Práctico N^o 6: Presión de vapor. Mezclas agua-etanol. Micrométodo.

Práctico N^o 7: Determinación de la constante de equilibrio de la reacción termocrómica de Rodamina B en soluciones alcohólicas.

Práctico N^o 8: Probabilidad y Distribución de Probabilidad. Microestados, Configuraciones y Configuración más probable.

BIBLIOGRAFIA:

- 1) Physical chemistry - 8th ed. Autor/es: Atkins, Peter W. - De Paula, Julio Freedman and company - New York. 2006
- 2) Química Física. Atkins, Peter y De Paula, Julio. 8va. Médica Panamericana S. A.. Año 2008
- 3) Physical Chemistry. 3rd Ed. Robert Mortimer, Elsevier. 2008.
- 4) Fisicoquímica. Castellan, Gilbert W. Fondo Educativo Interamericano – Barcelona. 1974
- 5) The principles of chemical equilibrium - 4th ed. Denbigh, Kenneth George Cambridge University Press - New York. 1997
- 6) Fisicoquímica. Ira Levine. 5^a Ed. Tomos I y 2. McGraw Hill-Interamerica de España. 2002
- 7) Quantum Chemistry, Donald Mc Quarrie, 2^d Ed. University Science Books. 2008
- 8) Introduction to Quantum Theory and Atomic Structure. P. A. Cox. Oxford University Press. Reprinted 2002
- 9) Química Cuántica. Ira Levine. 5^a ed. Pearson Education. Madrid 2001.
- 10) Statistical Thermodynamics. Fundamental and applications. Normad Laurendeau. Cambridge University Press. 2005.

- 11) Thermodynamics and Statistical Mechanics. John M. Seddon & Julian D. Gale. The Royal Society of Chemistry 2001.
- 12) Thermodynamics and Statistical Mechanics. Greiner Stöcker. Springer. 1997.

CRONOGRAMA de Actividades (Según horarios asignados)

| Semana N° | Jueves Mañana | Jueves Tarde | Viernes Mañana |
|-----------|---|---|---|
| 1 | Naturaleza atómico-molecular de la materia. Origen y naturaleza de las fuerzas intermoleculares. Estados de agregación: Gases, líquidos y sólidos. El modelo de gas ideal. Teoría Cinética del Gas Ideal. Cálculo de la Presión. Consecuencias de la Teoría Cinética: Ley de Graham. Distribución de velocidades y energía cinética: Ley de Maxwell y Boltzman. | Ejercicios y Problemas sobre teoría cinética. | Gases Reales: Desviaciones del comportamiento ideal: Formas de expresión: Factor de compresibilidad, ecuaciones viriales y ecuaciones cúbicas de estado. Licuación de gases. Isotermas de Andrews. El punto crítico. Principio de los estados correspondientes. Problemas Modelo sobre gases reales. |
| 2 | Termodinámica Clásica. Interacción sistema ambiente. Calor, Trabajo y Energía Interna: Primera Ley. Procesos termomecánicos (isotérmicos, isobáricos, isocóricos, adiabáticos). Función Entalpía. Efectos térmicos a presión y volumen constante: Capacidades Caloríficas. | Ejercicios y Problemas sobre Primera Ley. | Capacidades Caloríficas. Termoquímica: Calores de formación, Energías de unión promedio y entalpías de disociación. Planteo y discusión de problemas seleccionados |
| 3 | Segunda Ley. Procesos Reversibles e irreversibles (espontáneos). La función entropía. Formulación y cálculos. Tercera Ley: Entropías absolutas. Planteo y discusión de problemas seleccionados | Trabajo Práctico de Laboratorio N° 1 | Condición de equilibrio termodinámico. Funciones termodinámicas auxiliares. Sistemas abierto y cerrado. Potenciales termodinámicos. El potencial químico. Termodinámica de gases reales: fugacidad. Ejercicios y Problemas. Consulta temática. |
| | Equilibrio entre fases. Regla de las fases de Gibbs. Sistemas de un | Trabajo Práctico de Laboratorio N° 2 | Sistemas de dos o más componentes: Propiedades termodinámicas de mezclas: |

| | | | |
|---|--|---|---|
| 4 | componente. Equilibrio físico: Diagramas. Ecuaciones de Clapeyron y Clausius-Clapeyron. Ejercicios y Problemas Seleccionados. | | Soluciones. Propiedades Molares parciales. Definición y Cálculo a partir de datos experimentales (Calores de mezcla y volúmenes) Ejercicios y Problemas seleccionados. |
| 5 | El potencial químico en mezclas. Las leyes empíricas de Raoult y Henry. Diagramas. Propiedades termodinámicas de mezclas. Solubilidad. Propiedades coligativas. Ejercicios y Problemas seleccionados. | 1er. Parcial. | Ecuación de Gibbs-Dühem. Ecuación de Margules Soluciones no ideales. El concepto de actividad y coeficiente de actividad, convenciones. Ejercicios y Problemas seleccionados. |
| 6 | Equilibrio Químico. Expresión de la condición de equilibrio en términos de potencial químico. La constante de equilibrio: Diversas expresiones. Ejercicios y Problemas seleccionados. | Trabajo Práctico de Laboratorio N° 3 | Dependencia de la constante de equilibrio con la presión y la temperatura. Equilibrio de reacciones de gases y en solución. Ejercicios y Problemas seleccionados. |
| 7 | Semana Complementaria de Consultas y Repasos | Trabajo Práctico de Laboratorio N° 4 | Ejercicios y Problemas |
| 8 | Elementos de Mecánica Cuántica. Antecedentes históricos. Radiación del Cuerpo Negro. Aspectos experimentos y teorías clásicas. Leyes de Wien, Stefan-Boltzman. Hipótesis cuántica de Planck. | Ejercicios y Problemas de Mecánica Cuántica | Efecto Fotoeléctrico. Fotones. Difracción de electrones. Ondas de materia. Hipótesis de De Broglie.. Principio de Incerteza de Heisemberg. Ecuación de Schrödinger. Función de Onda: significado y propiedades generales. |
| 9 | Modelo de Partícula libre, en el pozo de potencial, en la caja cúbica. Funciones de onda y niveles de energía. Degeneración | Ejercicios y Problemas de Mecánica Cuántica | Oscilador Armónico Simple: funciones de onda y niveles de energía. Operadores en Mecánica Cuántica. Valor medio de un observable. Ortogonalidad de funciones de onda. |

| | | | |
|----|---|--------------------------------------|--|
| 10 | Algebra de Operadores. Conmutación y su significado. Operadores de momento angular: conmutación y autovalores. Niveles de energía de un Rotor Rígido. | Segundo Parcial | Ejercicios y Problemas de Mecánica Estadística. |
| 11 | Elementos de Mecánica Estadística. Sistemas, Conjuntos, Distribuciones. Probabilidad de una distribución. La distribución más probable. | Trabajo Práctico N° 5. | Conjuntos Microcanónico y Canónico. Distribución de Boltzmann Termodinámica Estadística. Ejercicios y Problemas de Mecánica Estadística. |
| 12 | Interpretación estadística del calor y el trabajo. Entropía y probabilidad. Entropía de un gas monoatómico: Ecuación de Sackur- Tetrode Ejercicios y Problemas sobre Mecánica Estadística. | Trabajo Práctico de Laboratorio N° 6 | Sistemas de partículas distinguibles e indistinguibles. Cálculo de la función de partición: translacional; rotacional y el número de simetría; vibracional y electrónica Función de Partición y Funciones Termodinámicas. Aplicaciones. Energía promedio y el principio de equipartición Ejercicios y Problemas sobre Mecánica Estadística. |
| 13 | Capacidades Caloríficas. Constante de Equilibrio y funciones de partición. Cálculo estadístico de constantes de equilibrio para sistemas gaseosos Ejercicios y Problemas sobre Mecánica Estadística. | Trabajo Práctico de Laboratorio N° 7 | Tercer Parcial |
| 14 | Primer Recuperatorio | | Segundo Recuperatorio y Carga de regularidades |

