



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

**(Programa del año 2010)**

### **I - Oferta Académica**

| <b>Materia</b>   | <b>Carrera</b>  | <b>Plan</b> | <b>Año</b> | <b>Período</b>  |
|------------------|-----------------|-------------|------------|-----------------|
| QUIMICA FISICA I | LIC. EN QUIMICA | 5/04        | 2010       | 2° cuatrimestre |

### **II - Equipo Docente**

| <b>Docente</b>            | <b>Función</b>          | <b>Cargo</b> | <b>Dedicación</b> |
|---------------------------|-------------------------|--------------|-------------------|
| ZAMARBIDE, GRACIELA NIDIA | Prof. Responsable       | P.Tit. Exc   | 40 Hs             |
| ABELLO, MARIA CRISTINA    | Prof. Colaborador       | P.Adj Exc    | 40 Hs             |
| MONTAÑA, MARIA PAULINA    | Prof. Colaborador       | P.Adj Exc    | 40 Hs             |
| ANDRADA, MATIAS FERNANDO  | Auxiliar de Laboratorio | JTP Exc      | 40 Hs             |
| DAVILA, YAMINA ANDREA     | Auxiliar de Laboratorio | A.1ra Semi   | 20 Hs             |

### **III - Características del Curso**

| <b>Credito Horario Semanal</b> |                 |                          |                                              |              |
|--------------------------------|-----------------|--------------------------|----------------------------------------------|--------------|
| <b>Teórico/Práctico</b>        | <b>Teóricas</b> | <b>Prácticas de Aula</b> | <b>Práct. de lab/ camp/ Resid/ PIP, etc.</b> | <b>Total</b> |
| Hs                             | 6 Hs            | 3 Hs                     | 3 Hs                                         | 10 Hs        |

| <b>Tipificación</b>                            | <b>Periodo</b>  |
|------------------------------------------------|-----------------|
| B - Teoría con prácticas de aula y laboratorio | 2° Cuatrimestre |

| <b>Duración</b> |              |                            |                          |
|-----------------|--------------|----------------------------|--------------------------|
| <b>Desde</b>    | <b>Hasta</b> | <b>Cantidad de Semanas</b> | <b>Cantidad de Horas</b> |
| 09/08/2010      | 19/11/2010   | 15                         | 150                      |

### **IV - Fundamentación**

Los contenidos de la asignatura han sido seleccionados, dentro del contexto del plan de estudio correspondiente, con el objeto de proveer la fundamentación teórica y experiencias de laboratorio, de los distintos aspectos fenomenológicos de la química, contribuyendo de esa manera a la formación científica básica del alumno. Para ello y con el objeto de lograr la adecuada articulación del programa, se han tenido en cuenta los fundamentos matemáticos, físicos y químicos que el alumno ha adquirido en las asignaturas previas, como así también los requerimientos de asignaturas posteriores. La termodinámica clásica constituye el eje temático de la asignatura (Temas 1-5), sobre esta base y desarrollando los conceptos correspondientes, se introduce el estudio de los procesos irreversibles y la termodinámica estadística.

### **V - Objetivos / Resultados de Aprendizaje**

Otorgar una formación epistemológica en función de los objetivos básicos de la Termodinámica. Realizar una correcta descripción de los distintos fenómenos fisicoquímicos que afectan a los procesos químicos y biológicos para lograr la interpretación adecuada de los aspectos fenomenológicos. Proporcionar las herramientas necesarias para el manejo técnico y práctico de los problemas asociados a la energía y sus transformaciones.

### **VI - Contenidos**

**CONTENIDOS MÍNIMOS:**

Gases Ideales y Gases Reales. Teoría cinética de los gases. Primera Ley de la Termodinámica: Energía Térmica y Entalpía. Termoquímica. Segunda y Tercera Ley de la Termodinámica.: Entropía y Energía Libre. Criterios de espontaneidad. Tratamiento Termodinámico del Equilibrio Químico: Potencial Químico. Equilibrio de fases. Soluciones: Propiedades coligativas. Equilibrio en sistemas no ideales: el concepto de actividad. Equilibrio iónico. Electroquímica. Introducción a la Termodinámica de los procesos irreversibles. Introducción a la Termodinámica estadística.

## **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<sub>2</sub>O, el CO<sub>2</sub> 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. Electroodos. 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.**

## **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 FISICO: verificación de la ley de reparto de Nernst para el sistema:  $I_2$  (solute);  $H_2O$  y  $Cl_4C$  (solventes).
- 5.- EQUILIBRIO QUÍMICO: determinación de la constante de equilibrio para la reacción:  $I_2 + KI \rightarrow I_3 + K^+$ , 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:  $CuSO_4 + Zn \rightarrow ZnSO_4 + Cu$  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:  $DG^\circ$ ,  $DH^\circ$  y  $DS^\circ$  a partir de mediciones de f.e.m. a distintas temperaturas (coeficiente de temperatura).

## NORMAS DE SEGURIDAD PARA LA REALIZACION DE LOS TRABAJOS PRÁCTICOS DE LABORATORIO

Remitirse a la Guía de TP de Laboratorio.

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

### NORMAS DE SEGURIDAD PARA LAS CLASES TEORICAS Y PRÁCTICAS

- 1) Las clases, de carácter teórico-práctico, se cumplirán en el aula y en los horarios asignados por el Departamento de Química.
- 2) Las comunicaciones o citas se harán por medio del avisador de la Cátedra. En caso de situaciones imprevistas se comunicará además mediante Internet.
- 3) Antes de empezar el trabajo familiarizarse con los elementos de seguridad disponibles y seguir, rigurosamente, las indicaciones del profesor a cargo respecto a:
  - a) No comer ni beber en el Aula.
  - b) Prohibido fumar.
  - c) Mantener el área de trabajo siempre limpia y ordenada.
  - d) Consultar al Jefe de Trabajos Prácticos y Ayudantes ante cualquier duda.
  - e) Tener en cuenta las salidas de Emergencia del aula y del edificio.
  - f) Identificar los lugares donde se encuentran los matafuegos.
  - g) Verificar que el equipo a utilizar esté correctamente conectado. Consultar ante cualquier duda.
  - h) No caminar por el aula innecesariamente. Tampoco correr, ni aún en caso de accidentes.

## 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.
- 7.- Antes de empezar el trabajo en el laboratorio familiarizarse con los elementos de seguridad disponibles y seguir, rigurosamente, las indicaciones que figuran en la guía de trabajos prácticos y las del profesor a cargo.

## IX - Bibliografía Básica

- [1] .- Atkins y de Paula: Atkins Química Física, Octava Edición, Ed. Panamericana, (2006)
- [2] - Castellan, G.: Fisicoquímica, Fondo Educativo Interamericano, (1978)
- [3] - Glasstone S. : Termodinámica para Químicos. Editorial Aguilar. (1970)
- [4] - Levine, Ira. Quantum Chemistry. Fifth Edition. Editorial Prentice Hall (2000).
- [5] .- Callen,H.B. Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics. Wiley, 2nd. Ed. (1985)
- [7] .- Pitzer,K.S.; Thermodynamics. McGraw-Hill, 3rd. Ed. (1995).
- [8] .- Tester,J/W. y Modell,M; Thermodynamics and its Applications. Prentice Hall, 3rd. Ed. (1997).

## **X - Bibliografía Complementaria**

- [1] •CROW D.: Principles and Applications of Electrochemistry, Champan and Hall.
- [2] •EGGERS D. y Otros: Fisicoquímica. Editorial Limusa-Weley.
- [3] •HOUGEN D. y Otros: principios de los Procesos Químicos, parte II Termodinámica. Editorial Reverté.
- [4] •KAUZMAN W. : Propiedades Térmicas de la Materia; Vol. I. Teoría Cinética de los Gases; Vol. II Termodinámica y Estadística. Editorial Reverté.
- [5] •FINDLAY A. : The phase rule. Diver Pub. 9th Editorial
- [6] •GROOT S. : Thermodynamics of Irreversible Processes. North Holland Plub. Co.
- [7] •MOORE W.: Physical Chemistry. Editorial Prentice Hall.
- [8] •SEARS F.: Termodinámica. Editorial Reverté.
- [9] [•SMITH J. : and VAN NESS C.: Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics. Mc Graw—Hill.

## **XI - Resumen de Objetivos**

Al desarrollar los temas que componen el programa del curso, el alumno será capaz de interpretar los diversos fenómenos que ocurren en sistemas químicos y biológicos, mediante la aplicación de los fundamentos fisicoquímicos.

## **XII - Resumen del Programa**

- .- 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**

Aclaración sobre la distribución horaria:

Durante 9 semanas se dictan 12 hrs semanales:(3TPL, 3TPA y 6 CT)

Durante 3 semanas se dictan 9 hrs semanales:(3TPA, 6 CT)

Durante 3 semanas se dictan 5 hrs semanales:(2CT,3TPA y parc.)

## **XIV - Otros**