

DEPARTAMENTO: Química Inorgánica, Analítica y Química Física

ASIGNATURA: Química Física I

CARRERA: Licenciatura en Ciencias Químicas

CARACTER: Obligatorio

DURACION: Cuatrimestral

PLAN:

HORAS DE CLASE:

a) Teóricas: 4 Hs.

b) Problemas: 6 Hs.

c) Laboratorio: 5 Horas

d) Seminarios

Total: 15 Hs.

*Horas teóricas-prácticas

ASIGNATURAS CORRELATIVAS: Física II, Física III, Análisis II, Orgánica I y Química Analítica Cuantitativa.

PROGRAMAParta A: Fundamentos

1.- Partículas y ondas. La relación de De Broglie. Energía traslacional. Energía rotacional y vibracional. Evidencia espectroscópica. Energía electrónica. Interacciones intermoleculares de largo y corto alcance. Gases ideales: Energía, presión y temperatura. Rol de las interacciones en gases reales, líquidos y sólidos.

2.- Equilibrio termodinámico y funciones de estado. Principios de la termodinámica: introducción axiomática. Sistemas de varios componentes. Potencial químico. Propiedades molares parciales. Ecuación de Gibbs-Duhem. Tipos de equilibrio. Regla de la fases. Espontaneidad. Estabilidad. Potenciales termodinámicos. Relaciones termodinámicas.

3.- Distribución de Boltzman y temperatura. Derivación. Población relativa de niveles energéticos. El concepto estadístico de entropía. Entropía y desorden. Calor y trabajo: interpretación molecular. Conjuntos y reservorios. Función de partición molecular y del sistema. Relación con funciones termodinámicas. Integral configuracional.

Parte B: Aplicaciones

4.- Los estados de la materia. Gases ideales. Cálculo estadístico de funciones termodinámicas. Gases reales. Ecuaciones de estado. Fuerzas intermoleculares y ley de estados correspondientes. Potencial químico y fugacidad. Líquidos. Descripción macro y microscópica. Funciones de distribución. Sólidos. Modelo de Einstein. Introducción al modelo de Debye. Tercer principio de la termodinámica.

5.- Equilibrio de fases en sistemas de un componente. Diagramas. Funciones termodinámicas de cambio de estado. Ecuaciones de Clapeyron y Clapeyron-Clausius. Determinación de entropías absolutas.

6.- Mezclas ideales y reales. Mezclas de gases. Regla de Lewis y Randall. Coeficientes de virial de mezclas. Mezclas líquidas. Leyes de Raoult y Henry. Potencial químico y actividad. Estado tipo. Coeficientes de actividad. Funciones de estado de mezcla y exceso. Determinación de actividades. Ecuación de Duhem-Margules.

7.- Azeótropos. Miscibilidad parcial. Diagramas de fases. Aspectos generales y diagramas de fases de equilibrio gas-líquido, líquido-sólido y sólido-sólido. Propiedades coligativas de soluciones. Sistema de varios componentes. Modelos de soluciones binarias líquidas. Soluciones regulares. Aspectos estadísticos. Volúmenes moleculares y fuerzas intermoleculares.

8.- Equilibrio químico. Estequiometría y grado de avance. Afinidad química. Constantes de equilibrio. Dependencia con la temperatura y la presión. Cálculo de entalpías, entropías y entalpías libres tipo. Uso de tablas. Variación con la temperatura. Efecto de cambio de fases. Aspectos estadísticos de reacciones químicas en fase gaseosa. Predicción de constantes de equilibrio. Factores energéticos y entrópicos y su relación con la estructura molecular.

9.- Soluciones de electrolitos. Termodinámica de iones. Actividad y coeficientes de actividad. Efecto de la fuerza iónica. Teoría de Debye-Hückel. Extensiones empíricas. Potencial electroquímico. Celdas galvánicas. Equilibrio electroquímico y ecuación de Nernst. Determinación de actividades y constantes de equilibrio por vía electroquímica.

BIBLIOGRAFIA

Textos recomendados:

- 1.- W.J. Moore, "Fisicoquímica Básica", Prentice-Hall Hispanoamericana, 1986
- 2.- P.W. Atkins, "Fisicoquímica", fondo Educativo Interamericano, 1985
- 3.- R.E. Dickerson, "Molecular Thermodynamics", Benjamin, 1969
- 4.- R.S. Berry, S.A. Rice, J. Ross, "Physical Chemistry", Wiley, 1980
- 5.- E.A. Guggenheim, "Termodinámica", Technes, 1970

Textos adicionales:

- 6.- G.B. Castellan, "Physical Chemistry", Addison-Wesley, 1964
- 7.- D.F. Eggers, N.W. Gregory, G.D. Halsey, B.S. Rabinovitch, "Fisicoquímica", Wiley, 1967
- 8.- S. Glasstone, "Termodinámica para Químicos", Aguilar, 1966
- 9.- F.W. Sears, "Termodinámica, Teoría Cinética de los Gases y Mecánica Estadística", Reverté, 1959
- 10.- E.A. Moelwyn-Hughes, "Physical Chemistry", Pergamon, 1961
- 11.- E.A. Guggenheim, "Ley de Distribución de Boltzman", Eudeba, 1965

Fecha:

Firma Profesor:

Dr. R.J. Fernández Prini

Dr. E.A. San Román

Aclaración de firma:

Dr. E.O. Timmermann

Firma Director:

Dr. ROBERTO J. FERNÁNDEZ PRINI
Director Interino
Dpto. Qc'a. Inorg. Anal. y Qc'a. Fis.

Aclaración de firma:

Dr. ROBERTO J. FERNÁNDEZ PRINI
Director Interino
Dpto. Qc'a. Inorg. Anal. y Qc'a. Fis.