

DUP.

Q I
1994
20

UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

DEPARTAMENTO: QUIMICA INORGANICA, ANALITICA Y QUIMICA FISICA

CARRERA: Licenciatura en Ciencias Químicas ORIENTACION: -

1er. CUATRIMESTRE: AÑO 1994

CODIGO DE CARRERA: 01

MATERIA: Química Física I CODIGO: 5016

PUNTAJE: -

PLAN DE ESTUDIO: AÑO 1987

CARACTER DE LA MATERIA: obligatoria

DURACION: cuatrimestral

HORAS DE CLASE SEMANAL: * Teóricas: 4 hs
* Problemas: 6 hs
* Laboratorio: 5 hs

TOTAL: 15 hs.

CARGA HORARIA TOTAL: 240

ASIGNATURAS CORRELATIVAS: Trabajos Prácticos: Física I, Análisis II, Qca. Orgánica I y Qca. Analítica. Qca. Inorgánica II.

FORMA DE EVALUACION: 2 parciales, evaluación en el laboratorio y 1 final.

PROGRAMA ANALITICO:

FUNDAMENTOS:

- 1) Termodinámica. Sistema, medio ambiente y proceso. Equilibrio termodinámico y funciones de estado. Principios de la termodinámica: introducción axiomática. Energía interna y entalpía. Entropía; variaciones interna y externa. Potencial químico. Tipos de equilibrio. Espontaneidad. Estabilidad. Potenciales termodinámicos. Relaciones termodinámicas. Regla de las fases. Extensión a sistemas de varios componentes.
- 2) Energías. Grados de libertad. Tratamiento clásico y expresiones cuánticas. Energía traslacional. Energía rotacional y vibracional. Evidencia espectroscópica. Energía electrónica. Interacciones intermoleculares de largo y corto alcance. Gases ideales: energía, presión y temperatura. Capacidades caloríficas. Equipartición. Rol de las interacciones en gases reales, líquidos y sólidos.

APROBADO POR RESOLUCION CD 596/94

//

- 3) Aspectos estadísticos. Distribución de Boltzmann 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.

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-Clasius. Determinación de entropías absolutas.
- 6) Mezclas ideales y reales. Propiedades molares parciales. Ecuación de Gibbs-Duhem. 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 mezclas 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. Modelos de soluciones binarias líquidas. Soluciones regulares. Aspectos estadísticos. Volúmenes moleculares y fuerzas intermoleculares.
- 8) Equilibrio químico. Estequiometría y grado de avance. Afinidad química. Constante de equilibrio. Dependencia con la temperatura y la presión. Cálculo de entalpías, entropías y entalpías libres tipo. Variación con la temperatura. Efecto de cambio de fases. Uso de tablas. 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:

- * Físicoquímica Básica; W.J. Moore, Ed. Prentice-Hall Hispanoamericana (1986)
- * Físicoquímica; P.W. Atkins, Ed. Fondo Educativo Interamericano (1985)
- * Molecular Thermodynamics; R.E. Dickerson, Ed. Benjamín (1969)
- * Physical Chemistry; R.S. Berry, S.A. Rice y J. Ross, Ed. Wiley (1980)
- * Termodinámica; E.A. Guggenheim, Ed. Technes (1970)

Textos adicionales:

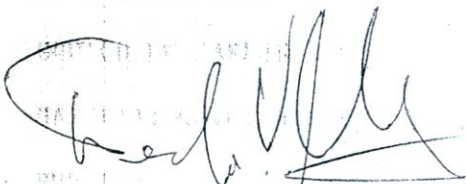
- * Physical Chemistry; G.W. Castellan, Ed. Addison-Wesley (1964)

///



///

- * Fisicoquímica; D.F.Eggers, N.W.Gregory, G.D.Halsey y B.S.Rabinovitch, Ed. Wiley (1967)
- * Termodinámica para Químicos; S.Glasstone, Ed. Aguilar (1966)
- * Termodinámica, Teoría Cinética de los Gases y Mecánica Estadística; F.W.Sears, Ed. Reverté (1959)
- * Physical Chemistry; E.A.Moelwyn-Hughes, Ed. Pergamon (1961)
- * Ley de Distribución de Boltzmann; E.A.Guggenheim, Ed. Eudeba (1965)



Dr. F. Molina



Dra. L.E. Dicelio



Dr. Fernández Prini



DR. ENRIQUE A. SAN ROMAN

Director

Depto. OCA. INORG. ANAL. OCA. FIS.