

Q.I. 2000
(6)

UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

DEPARTAMENTO: QUIMICA INORGANICA, ANALITICA Y QUIMICA FISICA

CARRERA: Licenciatura en Ciencias Químicas

ORIENTACION: ---

2do. CUATRIMESTRE: AÑO 2000

CODIGO DE CARRERA: 01

MATERIA: Química Física II

CODIGO: 5017

PUNTAJE: ---

PLAN DE ESTUDIO: AÑO 1987

CARACTER DE LA MATERIA: obligatoria.

DURACION: cuatrimestral.

HORAS DE CLASE SEMANAL:

*Teórico-prácticas: 10 hs

*Laboratorio: 5 hs

TOTAL: 15 hs.

CARGA HORARIA TOTAL: 240

ASIGNATURAS CORRELATIVAS: Química Física I (T.T.P.P.)

FORMA DE EVALUACION: 2 parciales y examen final.

PROGRAMA ANALITICO:

1.- TERMODINAMICA SISTEMAS MULTICOMPONENTES

1-a: Equilibrio y transporte entre fases y equilibrio. Equilibrio osmótico o de membrana. Proceso de mezcla ideal, características microscópicas. Propiedades molares parciales. Integración de Euler. Relacion de Gibbs-Duhem. Regla de las fases. Equilibrio de fases en sistemas de un componente y ecuaciones de Clapeyron y de Clapeyron-Clausius.

1-b: Gases. Gases reales y fugacidad. Mezclas de gases. Estado tipo. Funciones de mezcla y de exceso. Ecuaciones de estado. Ecuaciones de estados con segundo coeficiente de virial. Determinación de fugacidades.

1-c: Mezclas liquidas. Leyes de Raoult y Henry. Desviaciones de la idealidad. Determinación de actividades. Consistencia termodinámica. Soluciones regulares, modelos de red. Ecuaciones de estado y ecuaciones de Margules y de van Laar. Azeótropos. Miscibilidad parcial. Propiedades coligativas de las soluciones. Polímeros en solución. Fracción en volumen. Segundo coeficiente de virial osmótico. Solubilidad de sólidos no iónicos en líquidos y en fluidos supercríticos.

1.


Dra. LELIA E. DICELIO

Directora Adjunta

Depto. QCA, INORG. ANAL. QCA, FIS.

/

2- EQUILIBRIO QUIMICO

Grado de avance, afinidad química. Energía de Gibbs de reacción y constante de equilibrio. Entalpías, entropías y energías de Gibbs de reacción tipo. Formalización de Le Chatelier, efecto sobre el equilibrio químico de presión y temperatura. Aspectos estadísticos de reacciones en fase gaseosa.

3.- SUPERFICIES

Trabajo superficial y tensión superficial. Burbujas, gotas y capilaridad. Ecuación de Gibbs; exceso superficial. Fisisorción y quimisorción; isothermas de adsorción, monocapas. Isotherma de Langmuir y modelo estadístico. Determinación de área superficial.

4- SOLUCIONES DE ELECTROLITOS

Termodinámica de sistemas iónicos. Actividad media. Fuerza iónica. Teoría de Debye-Huckel y sus extensiones. Atmósfera iónica, conductividad de electrolitos, ecuación de Onsager. Equilibrio y transporte de materia entre fases cargadas, el potencial electroquímico. Doble capa eléctrica y electrocapilaridad, estabilidad de coloides. Equilibrios electroquímicos y ecuación de Nernst. Determinación de la actividad y propiedades termodinámicas de electrolitos.

5. CINETICA DE LAS REACCIONES QUIMICAS

5.a: Velocidad de las reacciones químicas. Orden de reacción y constante de velocidad. Ecuación de Arrhenius. Reacciones elementales. Mecanismos de reacción: intermediarios, estado estacionario. Reacciones paralelas, consecutivas y de equilibrio. Métodos experimentales: estacionario, en flujo, de mezclado rápido, de destello, de relajación.

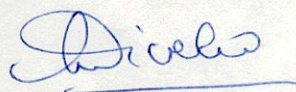
5.b: Teoría de reacciones elementales. Reacciones bimoleculares. Teoría de colisiones. Teoría del estado de transición. Superficies de energía potencial y coordenada de reacción. Formulación termodinámica y estadística. Reacciones unimoleculares y de asociación. Teoría de Lindemann.

5.c: Teoría de reacciones en solución. Control difusional y control activado. Efectos del solvente. Reacciones entre iones: efectos de la fuerza iónica y de la constante dieléctrica. Reacciones de transferencia de electrones.

5.d: Mecanismo de reacciones complejas. Reacciones en cadena: iniciación, propagación, terminación, ramificación, longitud de cadena. Catálisis homogénea. Relaciones lineales de energía libre. Fotoquímica. Transiciones radiativas y no radiativas. Diagramas de Jablonski. Rendimiento cuántico. *Quenching* de fluorescencia. Gráficos de Stern-Volmer. Fotodisociación. Fotosensibilizadores.

5.e: Reacciones heterogéneas. Adsorción y catálisis: mecanismos de Langmuir-Hinshelwood y Eley-Rideal. Fotocatálisis. Cinética de electrodo: energía de activación y potencial de electrodo. Relación corriente-potencial. Sobrepotencial. Control activado: ecuación de Butler-Volmer. Control difusional.

//..



Dra. LELIA E. DICELIO
Directora Adjunta
Depto. QCA. MORG. ANAL. QCA. FIS.

//..

Bibliografía

Textos generales:

- I. N. Levine, Fisicoquímica Vol. 1 y 2. Mc Graw - Hill 1996.
- G. W. Castellan. Addison - Wesley Iberoamericana. 2da Ed.
- P. W. Atkins, Fisicoquímica. Addison-Wesley Iberoamericana 3ra Ed.

Textos especializados (* indica Textos de consulta):

1) Termodinámica:

- E. A. Guggenheim, Termodinámica, Technes, 1970.
- R. Fernández Prini, E. Marceca, Materia y Moléculas. EUDEBA. 2000.
- *Denbigh, Thermodynamics of Equilibrium.
- *J. M. Prausnitz, Molecular Thermodynamics of fluid-phase Equilibria. Prentice-Hall Inc. 2da Ed.

2) Cinética

- Wilkinson, Chemical Kinetics and Reaction Mechanisms. Thetford, Norfolk. 1980.
- M. J. Pilling y P. W. Seakins, Reaction Kinetics. Oxford N. Y. University Press. 1995.



Dra. LELIA E. DICELIO
Directora Adjunta
Depto. QCA. 4ORG. ANAL. QCA. FIS.