CURSO: 2006/07
CENTRO: FAC. CC. EXPERIMENTALES
ESTUDIOS: LICENCIADO EN QUÍMICAS-2000
ASIGNATURA: **QUIMICA FISICA**
CÓDIGO: 5002103
CICLO: 1º
CURSO: 2º
CUATRIMESTRE: AN
CARÁCTER: TRONCAL
CRÉD. TEÓ.: 9,00
CRÉD. PRÁC.: 3,00

ÁREA: QUIMICA FISICA
DEPARTAMENTO: QUIMICA FISICA, BIOQUIMICA Y QUIMICA INORGANICA
DESCRIPTORES: TERMODINÁMICA QUÍMICA. ELECTROQUÍMICA. CINÉTICA FORMAL, MECANISMOS Y DINÁMICA MOLECULAR DE LAS REACCIONES QUÍMICAS. CINÉTICA ELECTROQUÍMICA.

TEMARIO DE TEORÍA

Tema 1. **Cinética Química I. Leyes Cinéticas.**
Qué es una ley cinética.
Cómo se determinan las leyes cinéticas.
Ecuaciones cinéticas de primer orden.
Ecuaciones cinéticas de otros órdenes.
Reversibilidad de las reacciones químicas.
Medida de constantes cinéticas de reacciones reversibles.
Dependencia de la temperatura de las constantes cinéticas.
La teoría del estado de transición.

Tema 2. **Cinética Química II. Mecanismos de reacción.**
Qué es un mecanismo de reacción.
Cuándo una reacción alcanza el equilibrio.
Cómo distinguir reacciones consecutivas de las de un solo paso.
Aproximación del estado estacionario.
Una ecuación cinética no implica un determinado mecanismo de reacción.
El mecanismo de Lindemann explica las reacciones unimoleculares.
Reacciones en cadena.
¿Qué es un catalizador?
Cinética enzimática básica.

Tema 3. **Teoría de las velocidades de reacción y dinámica de las reacciones.**
Teoría cinética de los gases.
Superficies de energía potencial.
Reacciones en disolución.
Modelos que describen reacciones bimoleculares en fase gaseosa.

Tema 4. **Propiedades de los gases.**
Cuándo se comportan de manera ideal.
Cómo matematizar comportamientos no ideales.
Una ecuación de estado cúbica describe los estados líquido y gaseoso.
Ecuación de estado del virial.

Tema 5. **El factor de Boltzmann y funciones de partición.**
Qué es y qué significado físico tiene el factor de Boltzmann.
Energía observada y energía promedio de un sistema coinciden.

Qué es la capacidad calorífica a volumen constante.
La presión en términos de la función de partición.
La función de partición de un sistema de partículas independientes y distinguibles.
La función de partición de un sistema de partículas independientes e indistinguibles.
La función de partición total como producto de funciones de partición por grado de libertad.

Tema 6. **Las funciones de partición y los gases ideales.**
Función de partición trasnacional de gases monoatómicos.
Función de partición electrónica de gases monoatómicos.
Energía de una molécula diatómica.
Función de partición vibracional de una molécula diatómica.
Función de partición rotacional de una molécula diatómica.
Moléculas poliatómicas.

Tema 7. **La primera ley de la termodinámica.**
El trabajo presión-volumen.
La energía es función de estado. Trabajo y calor, no.
Primera ley de la termodinámica.
Qué es un proceso adiabático.
Temperatura y expansión adiabática reversible.
Interpretación molecular de trabajo y calor.
Qué es el cambio de entalpía.
La capacidad calorífica depende del camino seguido.
Ecuación de Kirchoff.
Los cambios de entalpía son aditivos.
Cálculo de calores de reacción.
Dependencia de la temperatura de los calores de reacción.

Tema 8. **Entropía y segunda ley de la termodinámica.**
Qué determina el sentido de un proceso espontáneo.
Incremento del desorden al evolucionar sistemas aislados no en equilibrio.
La entropía en una función de estado.
Segunda ley de la termodinámica.
Interpretación molecular de la entropía.
Cuándo es posible calcular cambios de entropía.
Cómo se convierte el calor en trabajo.
La entropía en términos de función de partición.

Tema 9. **Entropía y tercera ley de la termodinámica.**
Dependencia de la entropía con la temperatura.
Tercera ley de la termodinámica.
Cambio de entropía en las transiciones de fase.
La ley T^3 de Debye.
Cómo determinar entropías absolutas.
Las entropías absolutas de gases se pueden calcular por la función de partición.
De qué dependen los valores de las entropías molares estándar.
Cuando las entropías espectroscópicas y calorimétricas no coinciden.
Cálculo de cambios de entropía de reacciones químicas.

Tema 10. **Energías de Helmholtz y Gibbs.**
Sentido de un proceso espontáneo a temperatura y volumen constantes.
Sentido de un proceso espontáneo a temperatura y presión constantes.
Las relaciones de Maxwell.
La entalpía de un gas ideal no depende de la presión.
Las funciones termodinámicas tienen variables independientes naturales.
Corrección de la no idealidad para hallar entropías molares estándar de gases reales.
La ecuación de Gibbs-Helmholtz.
La fugacidad mide la no idealidad de un gas.

Tema 11. **Equilibrios de fase.**

Diagramas de fases.
Relación entre la energía de Gibbs y el diagrama de fases.
Potenciales químicos en el equilibrio.
La ecuación de Clausius-Clapeyron.
Evaluación del potencial químico de una función de partición.

Tema 12. **Equilibrio químico.**
Cuándo se alcanza.
La constante de equilibrio sólo depende de la temperatura..
Cálculo de constantes de equilibrio a partir de energías de Gibbs estándar de formación.
El equilibrio está situado en un mínimo..
De qué depende el sentido en el que procede una reacción.
De qué depende el sentido de la espontaneidad de una reacción.
La ecuación de Van't Hoff.
Cálculo de constantes de equilibrio a partir de funciones de partición.
Constantes de equilibrio de gases reales.
Actividades y constantes de equilibrio termodinámicas.

Tema 13. **Disoluciones ideales.**
Disoluciones.
Escalas de concentración.
Disolución ideal: ley de Raoult.
Equilibrio líquido-vapor en disoluciones ideales: diagramas.
Disoluciones diluidas: ley de Henry.

Tema 14. **Disoluciones reales.**
Actividad y coeficiente de actividad.
Elección de los estados de referencia.
Funciones termodinámicas de mezcla y funciones de exceso.
Ecuaciones de Gibbs-Duhem y Duhem-Margules.

Tema 15. **Propiedades coligativas de las disoluciones.**
Descenso de la presión de vapor.
Elevación del punto de ebullición y descenso del punto de congelación.
Presión osmótica.
Aplicaciones: determinación de coeficientes de actividad y medida de masas moleculares.

Tema 16. **Disoluciones de electrolitos**
Actividad y coeficiente de actividad en electrolitos.
Coeficiente de actividad iónico medio y su determinación a partir de las propiedades coligativas.
Teoría de Debye-Huckel: Ley límite de Debye-Hückel.
Teorías para disoluciones concentradas.

Tema 17. **Electroquímica.**
Potencial electroquímico.
Potencial eléctrico de las interfases.
Tipos de electrodos.
Pilas electroquímicas y fuerza electromotriz.

TEMARIO DE PRÁCTICAS

En esta asignatura se darán 30 horas de clase de problemas.

BIBLIOGRAFÍA

- Levine, I.N. (2004) Ed. McGraw-Hill (2 volúmenes). "Fisicoquímica" (5ª edición)
- McQuarrie, D.A y Simon, J.D (1997) Ed. University Science Books. "Physical Chemistry".

- Logan, S.R. (1999) Ed. Pearson Addison Wesley. “Fundamentos de cinética química”.
- Abbot, M.M y Van Ness, H.C. (1972) Ed. McGraw-Hill. “Thermodynamics”.
- Atkins, P.W. (1999) Ed. Omega. “Química Física” (6ª edición).

CRITERIOS DE EVALUACIÓN.

Se realizará un examen parcial de la asignatura en Enero y un examen final en el mes de Junio.