

QUÍMICA FÍSICA

Enginyeria Química

Troncal: 6 crèdits (4,5 +1,5)

Objetivo: Conocer los fundamentos de la Termodinámica Química y de la Cinética Química

Lección 1. Conceptos fundamentales

Objeto de la Termodinámica. Sistema, Medio exterior y Universo. Estado de un Sistema. Variables Termodinámicas. Transformación de un Sistema. Transferencia entre el Sistema y el Medio exterior.

Lección 2. Principios de la Termodinámica y Funciones de Estado: U, H, S, A, G.

Energía, calor y trabajo. Principio cero. Primer principio: conservación de la energía, U. Segundo principio: evolución de los sistemas, S. Tercer principio. Funciones de estado: H, A, G. Expresiones de las diferenciales de las funciones de estado. Condición de evolución espontánea y equilibrio.

Lección 3. Potencial químico: m

Definición. Relaciones entre el potencial químico y las funciones de estado. Magnitud molar parcial: definición, expresión diferencial. Variación del μ con la presión y la temperatura. Expresiones del μ . Actividad del soluto. Estados standard, Magnitudes standard.

Lección 4. Magnitudes de una reacción química

Definición. Magnitudes standard de una reacción química: Significado y relaciones fundamentales. Convenciones relativas a las magnitudes de reacción química: Datos de las tablas en Termodinámica. Calculo de las magnitudes standard de reacción, Δ_rX° . Variación de $\Delta_rX^\circ(T)$ con la temperatura. Calores de reacción

Lección 5. Evolución y equilibrio

Condiciones de la evolución y del equilibrio. Expresión de Δ_rG y de la constante de equilibrio de una reacción, K° . Definición de la constante de equilibrio $K^\circ(T)$. Equilibrio: Relación de Guldberg y Waage. Ejemplos. Significado y utilidad de Δ_rG y Δ_rG° . Efecto de la temperatura en K° : Relación de Van't Hoff. Perturbación infinitesimal de un parámetro: Ejemplos. Perturbación finita: Sentido de la evolución.

Lección 6. Equilibrios de cambios de fase

Grados de libertad de un sistema en equilibrio: Teorema de Gibbs. Estados de la materia: Cambios de estado. Cambios de estado en un cuerpo puro: Calor latente de cambio de estado. Estudio de equilibrios binarios líquido-vapor. Diagramas binarios líquido-vapor isotermos e isóbaros. Equilibrios binarios isotermos: ley de Raoult y ley de Henry. Determinación de los coeficientes de actividad. Aplicación a la destilación. Diagramas de equilibrio binario sólido-líquido. Propiedades coligativas.

Lección 7. Cinética formal

Velocidad de una reacción. Molecularidad y orden. Ecuación de velocidad. Métodos experimentales. Método de integración y método diferencial. Reacciones complejas: reversibles, consecutivas y paralelas. Aproximaciones del estado estacionario y del equilibrio. Reacciones en cadena. Catálisis.

Lección 8. Cinética molecular

Dependencia de la constante de velocidad con la temperatura: ecuación de Arrhenius. Teoría de colisiones. Teoría del estado de transición. Formulación termodinámica.

Lección 9. Reacciones en disolución

Efecto del disolvente en las constantes de velocidad. Difusión. Reacciones controladas por difusión. Reacciones iónicas: influencia de la fuerza iónica. Aplicación de la teoría del estado de transición a los efectos del disolvente.

Evaluación: Examen

Bibliografía

P.W. Atkins, *Physical Chemistry*, Oxford University Press, **1998**

I.N. Levine, *Fisicoquímica*, McGraw Hill, **1996**

E.Brillas, R.M.Bastida, F.Centellas, X.Doménech, *Fonaments de Termodinàmica, Electroquímica i Cinètica*, Ed.Barcanova, **1992**

F.Brénon, C.Busquet, C.Mesnil, *Thermodynamique Chimique*, Hachette, **1993**

M.A.Oturán,M.Robert, *Thermodynamique Chimique*, EDP Sciences, **1997**

G.Price, *Thermodynamics of Chemical Processes*, Zeneca, **1998**

B.G.Cox, *Modern Liquid Phase Kinetics*, Zeneca, **1994**

S.Logan, *Fundamentos de la cinética química*, Addison-Wesley, **2000**