

AMPLIACION DE QUIMICA-FISICA I
(no especialidad)

TERMODINAMICA ESTADISTICA

- Lección 1. Distribución de partículas en los diferentes estados cuánticos. Introducción.- Estado macroscópico y microscópico de un sistema.- Probabilidad termodinámica.- Breve repaso de mecánica cuántica: postulados, operador hamiltoniano, spin de las partículas.- Estados simétrico y antisimétrico.- Bosones y Fermiones.- Distribución de Bose-Einstein (B-E).- Distribución de Fermi-Dirac (F-D).- Aproximación de las distribuciones de B-E y F-D: distribución de Maxwell-Boltzmann (M-B)
- Lección 2. Sistemas ideales en equilibrio. Estadística de Maxwell-Boltzmann. Introducción.- Interacción entre partículas.- Ley de distribución de Maxwell-Boltzmann.- Postulado fundamental de la Termodinámica-Estadística.- Ley de distribución de un sistema de partículas independientes.- Fluctuaciones: diferencia a la distribución más probable.- Relación entre entropía y probabilidad termodinámica.
- Lección 3. Funciones termodinámicas de los sistemas ideales: Función de partición de un gas ideal.- Determinación del multiplicador β .- Primer principio de la Termodinámica.- Expresión de la constante k .- Magnitudes termodinámicas de un sistema de partículas independientes.- Aditividad de las contribuciones de los distintos grados de libertad a las magnitudes termodinámicas.- Aplicación al estudio de los equilibrios químicos
- Lección 4. Sistemas de partículas sin interacción. Función de partición de partículas sin interacción.- Función de partición nuclear.- Función de partición electrónica. Función de partición de vibración.- Función de partición de rotación.- Contribución de los diferentes grados de libertad a las magnitudes termodinámicas.

Lección 5. Magnitudes Termodinamicas de un sistema de particulas en interacción. Introducción.- Colectivo canónico:ley de distribución.- Colectivo gran canónico:ley de distribución.- Determinación de multiplicadores.- Magnitudes termodinamicas de un sistema de particulas en interacción.- Fluctuaciones.- Caso particular de un sistema de particulas sin interacción-Aplicaciones.

ELECTROQUIMICA

Lección 6. Electroquimica Iónica. Interacción ión-disolvente. Introducción general: procesos electroquímicos. Electroquimica Iónica y Electródica.- Modelo de Born para el estudio de las interacciones ión-disolvente.- Entalpia, Entropia y Entalpia libre de la interacción ión-disolvente.- Comparación del modelo de Born con la experiencia.- Modelos estructurales.

Lección 7. Interacción ión-ión. Introducción Electrolitos verdaderos y potenciales.- Modelo de la nube iónica de Debye Hückel-Variación de potencial químico debido a las interacciones ión-ión.- Coeficiente de actividad:concepto y significado fisico.-Coeficiente de actividad iónico medio.- Ley limite de Debye-Hückel.- Comparación con los resultados experimentales.- Introducción del tamaño de los iones.

Lección 8. Transporte iónico en la disolución: Introducción.- Difusión. Primera ley de Fick. Segunda ley de Fick.- Conducción Electroquímica. Ley de Faraday.- Conductividad especifica, molar yequivalente.- Variación de la conductividad equivalente con la concentración: ley de Kohlrausch. Ley de migración independiente de los iones.- Movilidad iónica.- Numeros de transporte.- Teoria de Debye-Hückel-Onsager.- Electrolitos debiles. Teoria de Arrhenius.- Aplicaciones de la conducción.

- Lección 9. Termodinámica del equilibrio electroquímico. Introducción.- Células reversibles e irreversibles.- Fuerza electromotriz de una célula.- Entalpía libre y fuerza electromotriz: ecuación de Nernst.- Variación de la f.e.m. con la temperatura.- Tipos de electrodo.- Potencial normal de electrodo.- Diferencias de potencial en la interfase: potencial de unión líquida.- Potencial de membrana: electrodos selectivos.- Tipos de células electroquímicas: células químicas y de concentración con o sin transporte.- Aplicaciones de las medidas de f.e.m.: coeficientes de actividad, cálculos pH y solubilidad.
- Lección 10. Doble capa electroquímica. Introducción y descripción somera de la Doble Capa Electroquímica (D.C.E).- Termodinámica de la D.C.E. Interfase electrificada. Capacidad de la interfase.- Modelos estructurales de la D.C.E. Modelo de Helmholtz. Modelo de Gouy-Chapman. Modelo de Gouy-Chapman-Stern.- Importancia y velocidad de la adsorción específica de especies electroactivas y neutras.
- Lección 11. Cinética Electroquímica.- Introducción.- Ecuación cinética. Deducción. Parámetros cinéticos.- Corriente de canje. Relación de Butler-Volmer.- Curvas corriente-sobretensión. Ecuaciones de Tafel.- Cinéticas muy rápidas: comportamiento reversible o nernstiano.- Aspecto microscópico de la cinética de transferencia de carga.- Influencias de la D.C.E en la transferencia de carga.
- Lección 12. Reacciones electroquímicas acopladas con reacciones químicas. Introducción.- Clasificación de las reacciones Influencia de las reacciones químicas acopladas sobre los métodos electroquímicos.- Rango de tiempos útiles para diferentes técnicas electroquímicas.- Ecuaciones de difusión modificada y condiciones límite para distintos tipos de reacciones químicas acopladas Aplicaciones a esquemas sencillos de reacción.

Lección 13. Reacciones electroquímicas de especial interés: Procesos Electroorgánicos. Introducción.- Fundamentos teóricos y base experimental.- Reducción de grupos funcionales. Oxidación de grupos funcionales.

Professora: ILUMINADA GALLARDO

curr: : 1985/86

Mat i plau,

Signat:



Cap de Departament

data: 28/1/86