

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA

UNIDAD QUÍMICA FÍSICA

Asignatura:

FISICO-QUÍMICA (QUÍMICA FÍSICA)

(23488)

Licenciatura:

CIENCIA I TECNOLOGIA DELS ALIMENTS

(FACULTAT DE VETERINÀRIA)

CURSO: 1997/98

Profesor de la asignatura: Dr. Enrique Julve

Horario de atención al alumno: lunes de 11 a 13 h

Despacho: C7-127. Torre de Química. Química Física

OBJETIVOS

Los objetivos que se pretenden son, en primer lugar, dar al alumno conocimientos de Termodinámica Química, comenzando por los Principios de la Termodinámica y pasando después a las condiciones de equilibrio y espontaneidad generales, que le permitan comprender el concepto de potencial químico y el de equilibrio de fases.

Seguidamente, se estudian las disoluciones, tanto las ideales como las reales, con los conceptos de actividad y coeficiente de actividad.

Se progresa, luego, por el equilibrio de fases en sistemas multicomponentes y se llega al estudio del equilibrio químico, con los conceptos de constante de equilibrio y su dependencia de la concentración, de la presión y de la temperatura.

Se introduce después, al alumno, en los Fenómenos de transporte, estudiando los conceptos de conductividad térmica, viscosidad y transporte iónico (difusión, migración y conductividad eléctrica), para pasar a los fenómenos de superficie, con los conceptos de: tensión superficial, adsorción (quimisorción y fisisorción) y estudio de los correspondientes sistemas de adsorción.

Seguidamente se inicia la Cinética Química, primero con los conceptos de velocidad y orden de las reacciones y después con la dependencia de la constante de velocidad de la temperatura.

Se prosigue con el estudio de Reacciones complejas, contemplando las reacciones consecutivas, las paralelas y las reacciones en cadena.

Finalmente, se estudia la Catálisis: homogénea y heterogénea y la catálisis enzimática.

Créditos de la asignatura: 4 Teoría
2 Problemas

QUÍMICA FÍSICA (FISICO-QUÍMICA)

(CIÈNCIA I TECNOLOGIA DELS ALIMENTS)

TEORIA

0.- Introducció general

1.- Principis de la Termodinàmica

Sistemes termodinàmics. Funcions d'estat.- Temperatura, calor, treball i reversibilitat.- 1er. principi de la Termodinàmica. Energia interna i conservació de l'energia.- Estats de referència.- Entalpia.- Entalpia de reacció. Llei de Hess.- Capacitats calorífiques.- Llei de Kirchoff.- 2on. principi de la Termodinàmica. Entropia.- 3er. principi de la Termodinàmica.

2.- Condicions d'equilibri i d'espontaneïtat

Equilibri material.- Funcions de Helmholtz i de Gibbs.- Dependència amb la temperatura i la pressió: equació de Gibbs-Helmholtz.- Relacions termodinàmiques de sistemes en equilibri.- Potencial químic.- Condicions generals de l'equilibri material: condició de l'equilibri de fases i condició de l'equilibri químic.- Criteris d'espontaneïtat. La isoterma de reacció.

3.- Equilibri de fases. Dissolucions

Estat d'equilibri d'un sistema de fases: regla de les fases. Fases i components. Sistemes d'un component.- Equació de Clapeyron. Equilibris líquid-vapor, sòlid-vapor i sòlid-líquid.- Dissolucions.- Dissolucions ideals.- Propietats termodinàmiques de les dissolucions ideals. Llei de Raoult.- Dissolucions diluïdes ideals.- Propietats termodinàmiques de les dissolucions diluïdes ideals. Llei de Henry.- Propietats molars parcials.- Dissolucions reals. Activitat i coeficients d'activitat.

4.- Equilibri de fases en sistemes multicomponents

Diagrama de fases amb dos components.- Equilibri líquid-vapor per a dos components. Dissolució ideal a temperatura constant: regla de la palanca. Dissolució ideal a pressió constant: destil·lació fraccionada. Dissolucions no ideals.- Equilibri líquid-líquid per a dos components.- Equilibri sòlid-líquid per a dos components. Miscibilitat.- Propietats coligatives. Disminució de la pressió de vapor. Descens del punt de congelació. Elevació del punt d'ebullició. Pressió osmòtica.

5.- Equilibri químic

Estat d'equilibri d'un sistema.- Condicions d'equilibri químic i constant d'equilibri.- Constant d'equilibri en termes de concentracions molars, de pressions parcials i de fraccions molars.- Desplaçament de l'equilibri: principi de Le Chatelier. Efecte del canvi de concentració. Efecte del canvi de pressió. Efecte del canvi de temperatura.- Dependència de la constant d'equilibri amb la temperatura: equació del Vant'Hoff. Efecte d'un catalitzador.- Relació entre l'energia lliure de Gibbs i la constant d'equilibri.- Equilibri químic en sistemes no ideals. Constant d'equilibri.

6.- Fenòmens de transport

Introducció.- Teoria cinètica dels gasos.- Colisions moleculars i lliure recorregut mitjà.- Conductivitat tèrmica: llei de Fourier.- Teoria cinètica de la conductivitat tèrmica dels gasos.- Viscositat. Flux laminar i flux turbulent.- Llei de Poiseuille.- Transport iònic: difusió, migració i convecció.- Difusió: primera llei de Fick. Coeficient de difusió.- Segona llei de Fick.- Conductivitat elèctrica.- Conductivitat elèctrica de les dissolucions electrolítiques.- Conductivitat específica, conductivitat equivalent i conductivitat molar. Dependència de la conductivitat amb la concentració. Conductivitat equivalent i molar límit.- Mecanisme de l'emigració iònica: equació de Debye-Hückel-Onsager.

7.- Fenòmens de superfície

La interfase.- Tensió superficial.- Interfases curves: equació de Young.- Termodinàmica de superfícies. Excés superficial.- Adsorció del gasos sobre sòlids. Quimisorció i fisisorció.- Isotermes d'adsorció: isoterma de Langmuir, isoterma de Freundlich i isoterma de Brumauer-Emmett-Teller.

8.- Introducció a la Cinètica Química

Introducció: Cinètica Química.- Efecte de la concentració sobre la velocitat d'una reacció química: velocitat de reacció. Equació de velocitat i ordre de reacció.- Mètodes experimentals per a la medició de les velocitats de reacció.- Ordre i molecularitat.- Integració de les equacions de velocitat: determinació de l'ordre de reacció i de la constant de velocitat.- Període de vida mitja d'una reacció.- Efecte de la temperatura sobre la velocitat d'una reacció. Equació d'Arrhenius. Teoria de les colisions. Teoria de les velocitats absolutes o de l'estat de transició.

9.- Reaccions complexes

Tipus de reaccions: reaccions elementals i complexes.- Reaccions complexes o compostes.- Mecanisme de reacció.- Deducció de l'equació de velocitat a partir del mecanisme de reacció. Aproximació de l'etapa de la velocitat determinant o aproximació d'equilibri. Aproximació de l'estat estacionari.- Reaccions reversibles o oposades.- Reaccions consecutives.- Reaccions paral·leles o competitives.- Reaccions en cadena. Cadena lineal. Cadena ramificada. Límits d'explosió.

10.- Catàlisi

Introducció. Tipus de catàlisi. Catàlisi àcid-base específica. Catàlisi enzimàtica. Catàlisi heterogènia.

PROBLEMAS

Se entrega al alumno una Colección de Problemas sobre la materia impartida en teoría a lo largo del curso.

BIBLIOGRAFIA

- * Físico Química
P.W. Atkins
Ed. Addison-Wesley (1994)
- * Físico Química
I.N. Levine
Ed. McGraw-Hill, 3^a Edició (1991)
- * Química Física. Vol. II
M. Díaz Peña i A. Roig Montaner
Ed. Alhambra (1986)

EVALUACIÓN

Al finalizar las clases teóricas y de problemas se realizará la evaluación del conocimiento que el alumno posee de la materia impartida.

Consistirá en un Examen Final de Teoría y Problemas.

Constará este examen de 6 preguntas en total, que podrán estar subdivididos en apartados.