

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: μ**

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. Cálculo de las magnitudes standard de reacción, $\Delta_r X^\circ$. Variación de $\Delta_r X^\circ(T)$ con la temperatura. Calores de reacción

Lección 5. **Evolución y equilibrio**

Condiciones de la evolución y del equilibrio. Expresión de $\Delta_r G$ 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 $\Delta_r G$ y $\Delta_r G^\circ$. 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 isoterms e isóbaros. Equilibrios binarios isoterms: 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 Termodinámica, Electroquímica i Cinética*, Ed.Barcelona, **1992**

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

M.A.Oturan, 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**