

UNIVERSIDAD NACIONAL DEL SUR

1
4

BAHIA BLANCA ARGENTINA

DEPARTAMENTO DE: QUIMICA

PROGRAMA DE: Físicoquímica A

CODIGO: 6097

AREA NRO: IV

H O R A S D E C L A S E

PROFESOR RESPONSABLE

TEORICAS

PRACTICAS

Dr. Pablo Carlos Schulz

Por semana

Por

Por semana

Por cuatrimestre

4

60

4 (problemas)

60

A S I G N A T U R A S C O R R E L A T I V A S P R E C E D E N T E S

A P R O B A D A S

C U R S A D A S

Química Inorgánica A

Física B

Química Orgánica A

Descripción:

Esta asignatura brinda los conceptos básicos para el conocimiento de la Termodinámica clásica y estadística, y una introducción a la estructura de la materia, la naturaleza de los enlaces químicos y el fundamento de técnicas espectroscópicas y su uso en dilucidación de estructura y propiedades de la materia. Para ello se utiliza tanto el enfoque clásico como el estadístico y el mecanocuántico. Está ubicada al finalizar el ciclo básico, como un compendio de los conocimientos adquiridos, y unida a las Físicoquímicas B y C, completa los conocimientos de fisicoquímica básica. Constituye así el fundamento de las asignaturas de profundización y / o aplicación en las carreras científicas vinculadas a la química. Los trabajos prácticos no son obligatorios y constan de clases de problemas.

Objetivo:

Que el alumno adquiera conocimiento de los siguientes temas: Teoría cinético-molecular. Termodinámica química clásica, fundamentos de termodinámica estadística. Fundamentos de estructura atómica y molecular y de enlaces químicos. Métodos espectroscópicos para el estudio de la materia.

PROGRAMA SINTÉTICO

- 1- Propiedades de gases y teoría cinético – molecular.
- 2- Introducción al estudio de la estructura atómica y molecular y de las propiedades de conjuntos estadísticos de partículas.
- 3- Introducción a la teoría del enlace químico
- 4- Espectroscopia molecular.
- 5- Propiedades eléctricas y magnéticas de las moléculas.
- 6- Primer principio de la termodinámica y termoquímica.
- 7- Segundo y tercer principios de la termodinámica. Funciones termodinámicas. Equilibrio químico.
- 8- Termodinámica estadística. Interpretación molecular de la energía libre, entropía y equilibrio químico.

VIGENCIA AÑOS

--	--	--	--	--	--	--

1.- PROPIEDADES DE GASES Y TEORÍA CINÉTICO – MOLECULAR. Leyes de gases ideales: Boyle, Charles o Gay – Lussac, ley general de los gases. Hipótesis de Avogadro. Leyes de Dalton y Amagat. Comportamiento no ideal. Punto crítico. Ley de Graham. Viscosidad de gases. Modelo cinético – molecular de los gases. Presión de un gas según Bernoulli. Velocidades moleculares, energías cinéticas y temperatura. Recorrido libre medio, diámetros de colisión y número de choques. Teoría cinética de la viscosidad de un gas. Teoría del comportamiento no ideal. Ecuación de van der Waals. Punto crítico. Ley de los estados correspondientes. Factor de compresibilidad. Ecuaciones virial.

2.- INTRODUCCIÓN AL ESTUDIO DE LA ESTRUCTURA ATÓMICA Y MOLECULAR. Teorías atómicas de Thompson y Rutherford. Radiación del cuerpo negro. Cuantización de la energía. Efecto fotoeléctrico. Espectros atómicos. Átomo de Bohr. Átomo de Bohr- Sommerfeld y Wilson. Spin. Principio de exclusión de Pauli. Postulados de De Broglie. Método de Schrödinger. Interpretación de la función de ondas. Principio de incertidumbre. Incertidumbre y causalidad. Principio de complementariedad. Aplicación al problema de una partícula en una caja de potencial. Soluciones para cajas mono y tridimensionales. Paridad. Ortogonalidad de las soluciones. Formulación axiomática de la mecánica ondulatoria. Momento de la partícula en una caja de potencial. Penetración en barreras de potencial. Efecto túnel. Ley de distribución de Boltzmann. El hamiltoniano en coordenadas polares y cilíndricas. Ejemplo de una caja de potencial circular. Átomo de hidrógeno, planteo y resolución con la ecuación de Schrödinger. Números cuánticos y funciones de onda para el átomo de hidrógeno. Spin. Unidades atómicas. Teorema de variaciones y el átomo de He. Función de onda completa y principio de exclusión de Pauli. Determinante de Slater. El método del campo autoconsistente y átomos polielectrónicos. Estructura periódica y tabla periódica. Potencial de ionización y afinidad electrónica.

3.- TEORÍA DEL ENLACE QUÍMICO. Enlace iónico. Enlace covalente. Funciones de onda aproximadas: método de variación. La molécula - ion de hidrógeno. Método de combinación lineal de orbitales atómicos. Orbitales enlazantes y antienlazantes. La molécula de hidrógeno. Métodos de Heitler y London y de los orbitales moleculares. Simetría de orbitales. Funciones de spin electrónico. Orbitales enlazantes y antienlazantes. Estados singulete y triplete. Formación de enlaces en moléculas diatómicas homonucleares. Orbitales σ y π . Ejemplos. Uniones heteronucleares. Carácter iónico. Electronegatividades. Valencias dirigidas. Hibridización. Enlaces σ y π . Enlaces en moléculas poliatómicas. Compuestos aromáticos y sistemas conjugados.

4.- ESPECTROSCOPIA MOLECULAR. Espectro de las radiaciones electromagnéticas. Rotación molecular y espectro rotacional. Distribución de niveles rotacionales. Vibración de enlaces. Oscilador armónico clásico y cuántico. Espectros vibracionales. Distribución de los niveles vibracionales. Nivel fundamental. Reglas de selección. Acoplamiento vibración- rotación. Espectros de rotación –vibración. Transiciones entre niveles electrónicos. Principio de Frank – Condon. Transiciones $\pi - \pi^*$. Espectroscopia de resonancia magnética nuclear. Desplazamiento químico e interacciones magnéticas nucleares. Espectroscopia de resonancia de spin electrónico.

5.- PROPIEDADES ELÉCTRICAS Y MAGNÉTICAS DE LA MATERIA. Momento dipolar. Principios electrostáticos fundamentales. Dieléctricos. Polarización por inducción y por orientación. Ecuaciones de Clausius – Mossoti y de Debye para la polarización molar. Determinación experimental del momento dipolar y polarización molar. Momento dipolar y carácter iónico. Propiedades magnéticas de la materia. Determinación. Paramagnetismo y diamagnetismo. Interpretación molecular del diamagnetismo y del paramagnetismo. Resultados de los estudios magnéticos en las moléculas.

6.- PRIMER PRINCIPIO DE LA TERMODINÁMICA Y TERMOQUÍMICA. Termodinámica. Sistema y medio ambiente. Tipos de sistemas. Estado. Funciones de estado. Tipos de transformaciones. Equivalencia entre trabajo y calor. Primer principio de la termodinámica. Dependencia de q y w con el camino de la transformación. Tipos de trabajo en procesos químicos. Energía interna. Trabajo de expansión. Transformaciones isotérmicas, isocoras, isobáricas y adiabáticas. Entalpía. Relación entre c_p y c_v en gases ideales. Experimento de Joule. Coeficiente de Joule-Thompson. Termoquímica. Medidas de calores de reacción. Variación de la energía interna y de la entalpía en transformaciones químicas. Relación entre ΔE y ΔH . Ecuaciones termoquímicas. Determinación indirecta de los calores de reacción. Ley de Hess. Calores normales de combustión. Calores normales de formación. Dependencia de los calores de reacción con la temperatura. Energías de enlaces. Sistemas abiertos y propiedades molares parciales. Entalpía de solución y de dilución.

7.- SEGUNDO Y TERCER PRINCIPIOS DE LA TERMODINÁMICA. Segundo principio de la termodinámica. El ciclo de Carnot y el rendimiento. Entropía. Cambios de entropía en algunos procesos simples. Cambios de entropía en transformaciones irreversibles. Interpretación cualitativa de la entropía. Tercer principio de la termodinámica. Valores absolutos de la entropía y su determinación. Consideraciones filosóficas acerca del segundo principio de la termodinámica. Energía libre de Gibbs y de Helmholtz. Cálculo para algunas transformaciones simples. Energía libre normal. Dependencia de la energía libre con la presión y la temperatura. Gases no ideales. Fugacidad. Estado normal de referencia para gases no ideales. Coeficiente de fugacidad de un gas. Actividad. Coeficiente de actividad. Relación entre ΔG^0 y la constante de equilibrio de una reacción. Constante de equilibrio. Equilibrios gaseosos, equilibrios homogéneos y heterogéneos. Dependencia de la energía libre y la constante de equilibrio con la temperatura. Potencial químico. Potencial químico en soluciones ideales y no ideales. Actividad. Estados de referencia.

8.- TERMODINÁMICA ESTADÍSTICA. Interpretación molecular de la entropía, energía libre y del tercer principio de la termodinámica. Ecuación de Boltzman – Plank. Enunciado de Boltzmann del segundo principio de la termodinámica. Entropía de mezcla. Deducción de la ecuación de Boltzman. Tipos de energía molecular. Interpretación cuántica de la distribución de energías de traslación. Energías de rotación y vibración. Energía térmica. Interpretación molecular de la energía interna y de la entalpía. Cálculo de las funciones de energía interna y entalpía. Interpretación molecular de c_p y c_v . Calores de reacción y modelo molecular. Funciones de partición. Entropía de traslación para gases ideales. Ecuación de Sackur y Tetrode. Entropías de rotación y vibración para un gas ideal diatómico.

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

G. Barrow. Química Física, 3^{ra} ed., Editorial Reverté (Base del curso, problemas)

Ya. Gerasimov, V. Dreving, E. Eriomin, A. Kiseliyov, V. Lebedev, G. Panchenkov, A. Shliguin, Curso de Química Física, Ed. Mir (1980) (consulta)

G. Barrow, Química Física para las Ciencias de la Vida, Reverté, (1976). (consulta de algunos temas, problemas)

S. Glasstone, Tratado de Química Física, Aguilar (1966) (consulta de teoría clásica)

C.R. Metz, Teoría y Problemas de Fisicoquímica, McGraw-Hill (serie de compendios Schaum) (1980) (Problemas)

F. Daniels, R.A. Alberty, Fisicoquímica, Cía. Editorial Continental, México (1975) (teoría y problemas, nivel medio)

P.W. Atkins, Fisicoquímica, Addison-Wesley Iberoamericana (1987) (Teoría y problemas, avanzado)

P.C. Schulz, Fisicoquímica para las ciencias de la vida, apuntes UNS, Dto. de Q. e I.Q., (1999) (Fisicoquímica clásica, nivel medio, de consulta)

AÑO	PROFESOR RESPONSABLE (firma aclarada)	AÑO	PROFESOR RESPONSABLE (firma aclarada)
	Dr. Pablo C. Schulz		
V I S A D O			
COORDINADOR AREA	SECRETARIO ACADEMICO	DIRECTOR	
	Dr. Mariano Garrido	Dra. Adriana G. Lista	
FECHA:	FECHA:	FECHA: Marzo 2017	