

I IDENTIFICACION DE LA ASIGNATURA

NOMBRE : QUIMICA
CODIGO : 25025
NIVEL : 06
T-E-L : 4-0-2
CARRERA : INGENIERIA FISICA
CARACTER : OBLIGATORIA

II OBJETIVOS GENERALES.

El alumno debe ser capaz de:

1. Relacionar estructura de la materia y propiedades que de ella se derivan.
2. Aplicar conocimientos de Física a sistemas con cambio químico.
3. Utilizar herramientas químicas en la caracterización de materiales.
4. Entender los procesos industriales desde el punto de vista de la química básica.

III CONTENIDOS. (Parte Teoría)

0) Termodinámica (Repaso)

Funciones y potenciales termodinámicos. Variables naturales. Aplicación a sistemas con cambio químico. El potencial químico en sistemas cerrados. Potencial químico de gases ideales y reales. Fenomenología e introducción a modelos simples basados en la teoría cinética de los gases.

1) La primera ley de la termodinámica en los cambios químicos. Fenomenología.

Medidas del calor de reacción. Cambios de entalpía y energía en reacciones químicas. Ecuaciones termoquímicas. Determinación indirecta del calor de reacción. Calores estándar de formación. Soluciones acuosas y calor de formación de iones. Dependencia en temperatura del calor de reacción.

2) La primera ley de la termodinámica en los cambios químicos. Interpretación molecular.

Mecánica cuántica. Breve historia. La naturaleza ondulatoria de la materia. Introducción a la ecuación de Schrödinger. Soluciones para la partícula en una caja. Energía de un conjunto de moléculas: el hamiltoniano de sistemas de partículas no interactuantes. Concepto de aditividad. Introducción a la distribución de Boltzmann. Interpretación cuántica de la distribución de energía translacional. Otros tipos de energía: resultados de la ecuación de Schrödinger para el rotor rígido y el oscilador armónico. Grados de libertad. Cálculos de energía y calor específico en gases ideales.

3) Introducción a la teoría de enlace químico.

Soluciones de la mecánica cuántica para el átomo de hidrógeno. Funciones de onda para un átomo hidrogenoide. El principio de exclusión de Pauli. La estructura electrónica y la tabla periódica. Relación de la estructura electrónica con la química de los elementos. El enlace iónico. El enlace covalente. Carácter iónico de un enlace. Electronegatividades. Valencia orientada: el enlace pi. Enlaces conjugados. Enlaces con orbitales d. Compuestos de coordinación.

4) La segunda ley y el equilibrio químico

La función energía libre y el potencial químico. Energía libre estándar. Dependencia en temperatura y presión. Aplicación a reacciones en gases no ideales: la fugacidad. Estado estándar de gases no ideales. Actividad y coeficiente de actividad. El potencial químico de los líquidos y las soluciones. Propiedades molares parciales en mezclas. Entropía de mezcla en soluciones no

electrolíticas. Propiedades coligativas. Aplicaciones a diagramas de fases y procesos de separación. Destilación. Relación entre el cambio de energía libre y la constante de equilibrio. Reacciones espontáneas. Ejemplos de equilibrios en diversos tipos de reacciones. Equilibrios en fase gaseosa. Equilibrios en solución de no electrolitos.

5) Termodinámica de soluciones de electrolitos.

Equilibrios de disociación de electrolitos. Grado de disociación. La constante de disociación del agua. Disolución de ácidos y bases: grado de disociación y pH. Constante de equilibrio de disociación. Soluciones buffer. Equilibrios de saturación y precipitación. Actividad de iones en solución. El coeficiente de actividad y la teoría de Debye-Hückel. La fuerza iónica media.

6) Electroquímica de equilibrio

Celdas electroquímicas. Semireacciones en electrodos. Reacciones de celdas y el potencial de celdas. Relación entre el potencial y la energía libre. La ecuación de Nernst. Celdas de concentración. Potenciales estándar. La serie electroquímica. Medidas electroquímicas de pH. Electrodos selectivos. Evaluación de propiedades termodinámicas con medidas electroquímicas.

7) Cinética química

Velocidad de reacción y técnicas experimentales. Orden de reacción. Ecuaciones integradas. Velocidad de reacción cerca del equilibrio: relajación. Dependencia en temperatura de las constantes de velocidad. Los parámetros de la ecuación de Arrhenius. Reacciones elementales y consecutivas. La aproximación del estado estacionario. Pre-equilibrio. Reacciones complejas. Reacción en cadena. Explosiones. Reacciones de polimerización. Catálisis homogénea. Catálisis enzimática. Autocatálisis. Introducción a la dinámica de reacción. Teoría de colisiones. Reacciones controladas por difusión. El estado de transición. Ecuación de Eyring. El complejo activado.

8) Electroquímica dinámica

Sistemas homogéneos. Teoría de transferencia electrónica. Resultados experimentales. Sistemas heterogéneos. La interfase solución-electrodo. La velocidad de transporte de carga. Voltametría. Electrólisis. Celdas galvánicas, baterías y celdas de combustible. Corrosión.

9) Espectroscopía.

Espectroscopía empírica. La ley de Lambert. Determinaciones espectroscópicas cuantitativas. Métodos experimentales. Espectroscopía rotacional y vibracional. Aplicaciones de espectroscopía IR y Raman vibracionales. Espectroscopía electrónica. Espectroscopía de rayos X, XPS y espectroscopía fotoelectrónica. Niveles de energía del núcleo en un campo magnético. NMR. Desplazamiento químico. Espectroscopía de resonancia de spin electrónico.

IV EVALUACION Y EXIGENCIAS.

Requisitos: Termodinámica

Evaluación: Se toman dos pruebas por semestre, cada una con recuperatorio. Se exige aprobar ambas para aprobar la materia. Las pruebas están basadas en problemas típicos similares a los de cada capítulo y en preguntas conceptuales para evaluar la comprensión de los temas.

V BIBLIOGRAFIA.

Physical Chemistry, PW Atkins, J. de Paula, Oxford University Press, seventh Edition
Physical Chemistry, Gordon Barrow, Mc Graw-Hill, Forth edition.