

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES CUAUTITLAN

LICENCIATURA EN: QUÍMICA.

NOMBRE DE LA ASIGNATURA: FISICOQUÍMICA I.

ÓRGANO INTERNO QUE COORDINA EL PROGRAMA DE LA ASIGNATURA:

DEPARTAMENTO DE: CIENCIAS QUÍMICAS.
SECCIÓN DE: FISICOQUÍMICA.

CICLO AL QUE PERTENECE: PROFESIONAL.

REQUISITO DE SERIACIÓN: MATEMÁTICAS II.
REQUISITO DE SERIACIÓN INDICATIVA: FÍSICA I.

CARÁCTER DE LA ASIGNATURA: OBLIGATORIA.

TIPO DE ASIGNATURA: TEÓRICO-PRÁCTICA.

MODALIDAD: CURSO / TALLER.

SEMESTRE: 2°.

NÚMERO DE HORAS /SEMANA/ SEMESTRE:

TEORÍA:

4

PRÁCTICA:

2

N° DE CRÉDITOS:

10

CLAVE

OBJETIVOS GENERALES DE LA ASIGNATURA:

Destacar la importancia del estudio de la Termodinámica Clásica como base de estudios cualitativos y cuantitativos en sistemas de interés en Química y disciplinas afines.

Establecer criterios de equilibrio en términos de propiedades termodinámicas.

Calcular las variaciones de las propiedades Termodinámicas.

Aplicar el concepto de equilibrio termodinámico a procesos químicos.

UNIDAD 1: INTRODUCCIÓN.

Número de horas de teoría: 1.

OBJETIVOS DE LA UNIDAD:

Describir el problema fundamental de la termodinámica.

Familiarizarse con el lenguaje de la termodinámica, logrando un uso adecuado del mismo y de conceptos básicos inherentes.

1.1. Posición e Importancia de la Termodinámica dentro de la Fisicoquímica

1.2. El problema fundamental de la Termodinámica.

1.3. El lenguaje de la termodinámica.

1.4. Definiciones: Sistema, Paredes, Estado, Trayectoria etc.

UNIDAD 2: COMPORTAMIENTO DE LA MATERIA.

Número de horas de teoría: 15.

Número de horas de taller: 8.

OBJETIVOS DE LA UNIDAD:

Justificar que el estado de cualquier sistema, está caracterizado por un conjunto de variables (temperatura, presión, etc.) y que estas variables están relacionadas entre sí a través de la ecuación de estado.

2.1. Variables que determinan el estado del sistema.

2.1.1. Variables extensivas e intensivas.

2.2. Ley cero de la Termodinámica.

2.3. Gases puros.

2.3.1 Comportamiento Presión-Volumen-Temperatura .

2.3.2. Las leyes de los Gases y la Teoría Cinético Molecular.

3.2. Coeficientes de respuesta (α y κ).

2.3.3. Ecuaciones de estado.

2.3.3.1 Ecuación del gas ideal.

2.3.3.2 Ecuaciones de gases reales.

2.3.3.3 Correlaciones generalizadas.

2.4. Líquidos puros.

2.4.1. Comportamiento Presión-Volumen-Temperatura.

2.4.2. Coeficientes de respuesta (α y κ).

2.4.3. Ecuaciones de estado.

2.4.3.1 Correlaciones generalizadas.

2.5. Sólidos puros.

2.5.1. Comportamiento Presión-Volumen-Temperatura.

2.5.2. Coeficiente de respuesta (α y κ).

2.5.3. Ecuaciones de estado.

- 2.5.3.1 Correlaciones generalizadas.
- 2.6. Transiciones de fase de sustancias puras en sistemas P, V, T.
- 2.6.1 Tipos de transiciones de fase.
- 2.6.2. Análisis cualitativo de los diagramas de fase.
- 2.7.- Mezclas de gases ideales.
- 2.7.1.- Presión parcial.
- 2.7.2. Volumen parcial.
- 2.7.3.- Fracción mol.

UNIDAD 3. PRIMERA LEY DE LA TERMODINÁMICA .

Número de horas de teoría: 14.

Número de horas de taller: 7.

OBJETIVOS DE LA UNIDAD:

Identificar a la energía, como una variable termodinámica que se conserva y que sus diferentes manifestaciones son susceptibles de medirse experimentalmente.

Aplicar la primera Ley de la Termodinámica al cálculo de las variables termodinámicas en sistemas cerrados, para distintos tipos de procesos, incluyendo reacciones químicas.

Realizar estudios energéticos de las reacciones químicas a través del cálculo de la entalpía, aplicando la Ley de Hess, y los conceptos de calor de reacción, calor de formación, calor de combustión, calor de atomización y energía de enlace, así como datos obtenidos por calorimetría.

3.1. La energía y sus manifestaciones.

3.1.1. Calor y trabajo.

3.1.1.1. Trabajo Máximo.

3.1.2. Definición de energía interna.

3.1.3. Funciones de estado y de trayectoria.

3.1.4. Postulado de Joule.

3.1.5. La ley de conservación y transformación de la energía y la 1ª Ley de la Termodinámica.

3.1.6. Diferencia entre proceso entre reversible, irreversible y cuasiestático.

3.2. Aplicaciones de la 1ª Ley de la Termodinámica a procesos reversibles en los que no hay reacción química ni transiciones de fase.

3.2.1. Proceso adiabático.

3.2.2. Proceso Isotérmico.

3.2.3. Proceso Isocórico.

3.2.3.1. Definición de capacidad calórica a volumen constante.

3.2.3.2. Coeficiente de Joule.

3.2.4. Proceso Isobárico.

3.2.4.1. Definición de capacidad calórica a presión constante.

3.2.4.2. Definición de Entalpía.

3.2.4.3. Coeficiente de Joule-Thompson.

3.3. Transiciones de fases.

3.3.1 Calor sensible y calor latente.

3.3.2. Calor asociado a un cambio de fase.

3.4. Termoquímica.

3.4.1. Definición de estado estándar.

- 3.4.2. Entalpía de formación. Reacción de formación.
- 3.4.3. Ley de Hess.
- 3.4.4. Dependencia de la entalpía de una reacción con la temperatura. Ecuación de Kirchhoff.
- 3.4.5. Energía de enlace.
- 3.4.6. Calorimetría.

UNIDAD 4. SEGUNDA LEY DE LA TERMODINÁMICA.

Número de horas de teoría: 10.

Número de horas de taller: 5.

OBJETIVOS DE LA UNIDAD:

Explicar el origen del concepto de entropía a través del análisis generalizado del ciclo de Carnot, reconociendo a la entropía como un parámetro para decidir en que dirección ocurren los procesos de manera espontánea.

Calcular las variaciones de entropía en los diferentes procesos termodinámicos incluyendo reacciones químicas y transiciones de fase.

Explicar las implicaciones que tiene la ecuación de Boltzmann, la cual relaciona entropía y probabilidad, el significado de los factores entrópicos en el estudio de procesos físicos y químicos y constatar así, el carácter estadístico de la segunda ley de la termodinámica.

Utilizar la tercera ley de la Termodinámica para evaluar entropías absolutas.

4.1. Limitaciones de la 1° Ley de la Termodinámica.

4.1.1. Procesos reversibles e irreversibles.

4.2. El Ciclo de Carnot .

4.2.1. La eficiencia en el ciclo de Carnot.

4.2.2. Derivación de la escala de temperatura termodinámica.

4.2.3. La entropía como función de estado.

4.2.4. La desigualdad de Clausius.

4.2.4.1. Procesos espontáneos y no espontáneos.

4.3. Punto de vista estadístico de la entropía.

4.4. La Tercera Ley de la Termodinámica. Entropías absolutas.

4.5. Aplicaciones.

4.5.1. Cálculo de la variación de la entropía en procesos reversibles sin reacción química ni transiciones de fase.

4.5.1.1. Correlaciones generalizadas.

4.5.2. Cálculo de la variación de la entropía en transiciones de fase.

4.5.3. Cálculo de la variación de la entropía en reacciones químicas.

4.5.4. Cálculos de Entropías Absolutas.

UNIDAD 5. ESPONTANEIDAD Y EQUILIBRIO.

Número de horas de teoría: 10.

Número de horas de taller: 5.

OBJETIVOS DE LA UNIDAD.

Identificar a la energía libre de Gibbs y a la energía libre de Helmholtz como dos nuevas funciones de estado útiles en la descripción de los sistemas en equilibrio bajo ciertas condiciones.

Utilizar el método termodinámico para deducir las condiciones bajo las cuales las diferentes magnitudes termodinámicas dan criterio de equilibrio y espontaneidad en sistemas termodinámicos reales y calcularlas aplicando el método de las propiedades residuales.

Derivar del potencial químico, el concepto de fugacidad y coeficiente de fugacidad, así como su importancia en la evaluación de las propiedades termodinámicas de los sistemas reales.

Calcular la fugacidad y el coeficiente de fugacidad de gases puros.

5.1. Funciones auxiliares.

5.1.1. La Energía libre de Gibbs y la energía libre de Helmholtz.

5.1.1.1. Significado Físico.

5.1.1.1. Criterios de espontaneidad y equilibrio.

5.2. Relaciones de Maxwell.

5.3. Cálculo de ΔU , ΔH , ΔA , ΔG y ΔS por el método de las propiedades residuales.

5.4. El Potencial químico.

5.4.1. Fugacidad y coeficiente de fugacidad.

5.4.1.1. Cálculo de Fugacidades y Coeficientes de fugacidad.

UNIDAD 6. EQUILIBRIO QUÍMICO.

Número de horas de teoría: 8.

Número de horas de taller: 4.

OBJETIVOS DE LA UNIDAD.

Caracterizar, a través de la constante de equilibrio, el estado de equilibrio en sistemas con reacción química con comportamiento real e ideal.

Evaluar la composición en el equilibrio.

Calcular las constantes de equilibrio en sistemas ideales y reales.

Evaluar el efecto de la Temperatura y la Presión sobre la posición del equilibrio.

6.1. El concepto de equilibrio químico.

6.2. La constante de equilibrio en sistemas gaseosos.

6.2.1. La constante de equilibrio para reacciones entre gases ideales.

6.2.2. La constante de equilibrio para reacciones entre gases reales.

6.3. Cálculo de la composición en el equilibrio de una reacción química.

6.4. Influencia de la presión en el equilibrio químico.

6.5. Variación de la constante de equilibrio con la temperatura y la presión

6.6. Aplicaciones.

UNIDAD 7. GENERALIDADES DE CINÉTICA QUÍMICA.

Número de horas de teoría: 6.

Número de horas de taller: 3.

OBJETIVOS DE LA UNIDAD.

Describir cualitativamente, algunos conceptos fundamentales de la cinética química, así como el efecto de la temperatura y la presencia de un catalizador sobre la velocidad de reacción.

7.1. Definición de velocidad de una reacción.

7.2. Reacciones Simples.

7.2.1. Orden y Molecularidad.

- 7.2.2. Ecuación cinética de una reacción simple.
- 7.2.3 La constante específica de velocidad de una reacción. Unidades.
- 7.3. Reacciones Complejas.
 - 7.3.1. Mecanismo de reacción.
 - 7.3.2. Ejemplos.
- 7.4. Factores que afectan la velocidad de una reacción.
 - 7.4.1. Temperatura. Ecuación de Arrhenius.
 - 7.4.2. Catalizador. Tipos de Catálisis.

Las horas de taller serán dedicadas a la resolución de problemas relacionados con los contenidos temáticos de las unidades teóricas correspondientes.

METODOLOGIA DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE.

Exposición oral, se sugiere la realización de experimentos de cátedra.

Realización de problemas, dirigidos a brindar método y metodologías de trabajo. En algunos temas se sugiere la realización de Seminarios donde se discutan aspectos teóricos o se expongan, por parte de los estudiantes, artículos seleccionados por el profesor en la literatura científica.

La última unidad temática referente a la Cinética Química, se desarrollará solo al nivel cualitativo con problemas muy sencillos, únicamente para consolidar los conceptos de velocidad, constante de velocidad y orden.

Las actividades de taller serán para la resolución de problemas y deberán desarrollarse en coordinación con el profesor de teoría; estas actividades tendrán como objetivos esenciales el desarrollo de habilidades, así como la reafirmación de conceptos y su aplicación; por ello se recomienda, que en las actividades de taller los estudiantes trabajen mayormente de forma independiente.

PROPUESTA DE EVALUACIÓN.

Se sugieren tres exámenes parciales, complementados con una evaluación de la participación del estudiante, a través de criterios como: entrega de tareas, exposición en seminarios, asistencia a clase etc.

Las actividades de taller se evaluarán mediante el trabajo del estudiante en el salón, la entrega de series de problemas y alguna otra actividad que el profesor de taller, en coordinación con el de teoría, decidan. El taller deberá representar el 40% de la evaluación total de la materia.

PERFIL PROFESIOGRÁFICO DEL DOCENTE.

Profesional de la Química con experiencia en Físicoquímica o estudios de especialidad, maestría o doctorado en el área de Físicoquímica.

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA.

1. Ball, D.W. *Fisicoquímica*, Thomson, México, 2000.
2. Atkins, Peter W., et al. *Physical chemistry*, 7^a., W H Freeman and Company, 7^a., USA, 2001.
3. Castellan, Gilbert W. *Fisicoquímica*; 2^a., Addison Wesley Longman, México, 1998.
4. Laidler, K.J. y J.H. Meiser. *Fisicoquímica*, CECSA, México, 2000.
5. Levine, Ira N. *Fisicoquímica*, 4^a., McGraw Hill Interamericana, Madrid, 1996.

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA.

1. Barrante, James R. *Applied mathematics for physical chemistry*, 3^a., Prentice Hall, USA, 2003.
2. Barrow, Gordon M. *Physical chemistry*, McGraw Hill Higher Education, New York, 1996.
3. Berry, R. Stephen. *Physical chemistry*, 2^a., Oxford University Press, New York, 2000.
4. Smith, J.M., et al. *Introduction to Chemical engineering thermodynamics*, 6^a., McGraw Hill, New York, 2000.