



Gobierno de la Ciudad de Buenos Aires

Ministerio de Educación

Dirección de Educación Superior



Instituto Superior del Profesorado

"Dr. Joaquín V. González"

"2014. Año de las letras argentinas"

INSTITUTO SUPERIOR DEL PROFESORADO "DR. JOAQUÍN V. GONZÁLEZ"

Nivel: Terciario

Carrera: Profesorado en Química

Trayecto / ejes: disciplinar.

Instancia curricular: Química Física

Cursada: anual

Carga horaria: 6 horas cátedra semanales

Profesor: Dr. Miguel Katz

Año: 2014

Fundamentación:

A lo largo de la carrera el alumno del Profesorado de Química aprende distintos aspectos teóricos que permiten predecir ciertas propiedades de las sustancias o ciertas reacciones químicas. Ese conocimiento fragmentado es compilado y ordenado en el desarrollo formal de la materia Química Física donde se tratan de manera racional los fundamentos físicos de la Química. Durante el proceso de aprendizaje de la materia el alumno adquiere los conceptos fundamentales relativos a equilibrio, estructura y cambio, lo que le permitirá adaptarlo a las particularidades de cada rama de la química. Así, por ejemplo, la evaluación a priori de la variación de la energía libre en un proceso isotérmico e isobárico le permitirá predecir la ocurrencia o no de una reacción ya sea entre sustancias inorgánicas, orgánicas o en sistemas biológicos.

De esta manera los conocimientos de la materia actúan como "soportes teóricos" de otras disciplinas como la Química Inorgánica, Electroquímica, Química de Superficies, Química Orgánica, Química Biológica. Además, permiten entender los fundamentos teóricos de las operaciones unitarias y de los procesos de la industria química.

Los fundamentos físicos de la Química se pueden compendiar en cinco grandes grupos: aquellos que hacen a las interacciones submicroscópicas y que constituyen el tema central de la Química Cuántica; los correspondientes a los intercambios de energía, cuya base es suministrada por la Termodinámica; los que explican los fenómenos eléctricos mediante el estudio de la Electroquímica; los que se ocupan de las interacciones superficiales, es decir

Ayacucho 632 - Ciudad Autónoma de Buenos Aires - C1026AAF Teléfonos: (011)4372-8286/ 7973

e-mail: ies84de2@buenosaires.edu.ar

la Fisicoquímica de Superficies y aquellos que se refieren a las velocidades con que ocurren los procesos, que constituyen la base de la Cinética y la Catálisis.

Objetivos.

Tal como establece el Diseño Curricular, al finalizar el curso los alumnos deberán:

Al finalizar el curso los alumnos deberán:

Adquirir un conocimiento somero de las aplicaciones de la Termodinámica a la Química.

Conocer y saber emplear las leyes que rigen el comportamiento de sistemas fluidos electrolíticos y no electrolíticos.

Manejar los postulados de la Mecánica Cuántica.

Adquirir un conocimiento de los métodos variacionales y de perturbación para calcular energías de átomos polielectrónicos mediante funciones de onda aproximadas.

Adquirir un conocimiento somero de los métodos para calcular energías de moléculas mediante funciones de onda aproximadas

Tener nociones del Método del Enlace de Valencia (EV) y de Método del Orbital Molecular. Entender sus diferencias conceptuales y los esquemas que emplean para el cálculo de energías de enlace y distancias interatómicas.

Manejar sobre bases teóricas los conceptos de electronegatividad, energía de ionización y electroafinidad.

Manejar los postulados de la Mecánica Estadística y su aplicación a conjuntos canónicos, microcanónicos y grancanónicos.

Correlacionar los resultados de la Mecánica Estadística con la Termodinámica Clásica.

Poder integrar los conceptos de electroquímica con los aprendidos en el curso de Física II referidos a electricidad en sólidos.

Conocer las propiedades fisicoquímicas de las superficies y su relación con las fases de volumen de los sistemas materiales.

Poder aplicar los principios de la Cinética Química para elegir las condiciones más favorables de un proceso factible termodinámicamente.

Manejar los conceptos fundamentales de la catálisis en sus diversas modalidades y su aplicación a los procesos biológicos.

UNIDADES TEMÁTICAS

UNIDAD I. TERMODINÁMICA CLÁSICA

Capítulo 1:

La función energía libre: La función de trabajo de Helmholtz. La energía libre de Gibbs. Relación entre la función de trabajo y la energía libre. Energía libre y transformaciones isotérmicas. Ecuaciones de Gibbs - Helmholtz. Fórmulas termodinámicas.

Capítulo 2:

Termodinámica de sistemas abiertos. Propiedades parciales molares. Significado físico. Potencial químico. Equilibrio en sistemas heterogéneos. Variación del potencial químico con las variables de estado.

Equilibrios de fases. Equilibrios en sistemas de un componente. La ecuación de Clapeyron. Aplicación a distintos casos. La ecuación de Clausius - Clapeyron: su integración. Aplicaciones. Equilibrios en sistemas con más de un componente. Condiciones de equilibrio. Regla de las fases.

Fugacidad y actividad. Determinación de la fugacidad. Método generalizado. Fugacidad y variables de estado. Soluciones gaseosas ideales. Soluciones gaseosas reales. Fugacidad en soluciones líquidas. Actividad y coeficientes de actividad. Actividad de soluciones y variables de estado.

Energía libre y reacciones químicas. Constante de equilibrio. Equilibrios en sistemas homogéneos. Equilibrios en sistemas heterogéneos. Isoterma de reacción. Energía libre estándar de reacción. Energía libre y procesos espontáneos. Variación de la constante de equilibrio con la presión. Constante de equilibrio y temperatura. Ecuación de van't Hoff. Reacciones en sistemas heterogéneos: efecto de la temperatura. Integración de la ecuación de van't Hoff. Variación de la energía libre estándar con la temperatura. Energías libres estándar de formación. Energía libre estándar y variación de entropía. Aplicaciones: estudio termodinámico del proceso Haber para la síntesis del amoníaco.

Capítulo 3:

Termodinámica de soluciones. Soluciones de no electrolitos. Soluciones ideales. Ecuación de Duhem - Margules. Aplicación de la Ley de Raoult a ambos constituyentes de una solución ideal. Curvas de presión de vapor. Composiciones de equilibrio líquido - vapor. Influencia de la temperatura. Solubilidades de gases en líquidos. Influencia de la temperatura. Equilibrios sólido - líquido. Soluciones no ideales. Curvas de presión de vapor. Composiciones en ambas fases. Líquidos parcialmente miscibles. Soluciones diluidas. Ley de Henry. Punto de solidificación de soluciones diluidas. Determinación de masas moleculares relativas. Puntos de ebullición de soluciones. Aplicaciones: El proceso de destilación en la industria.

Soluciones de electrolitos. Actividad y coeficientes de actividad de electrolitos: Su determinación. Distintos métodos. Teoría de Debye -Hückel. Coeficiente de actividad iónica media. Aplicaciones. Ecuación de Debye - Hückel y constantes de equilibrio.

UNIDAD II: QUÍMICA CUÁNTICA**Capítulo 1:**

Operadores y funciones de onda: Álgebra de operadores. Valores propios y funciones propias. El operador hamiltoniano. Operadores hermíticos. Funciones de buen comportamiento. Postulados de la Mecánica Cuántica. Teorema del desarrollo. Postulado de Born. Principio de Correspondencia de Bohr. Degeneración de los niveles de energía. Momento angular. Números cuánticos. La ecuación de onda para el movimiento interno en un átomo de hidrógeno. Las funciones de onda completas para el átomo de hidrógeno. Representación espacial de los orbitales. Valores medios en Mecánica Cuántica. Funciones de distribución.

Capítulo 2:

Átomos Polieletrónicos: Métodos aproximados. El método variacional. Funciones variacionales lineales. Método de la perturbación. Números cuánticos de spin. El principio de exclusión de Pauli. Determinantes de Slater. Acoplamiento L - S en átomos polieletrónicos. El método del campo autoconsistente de Hartree - Fock.

Capítulo 3:

Uniones Químicas: El enlace covalente. Estructura electrónica de moléculas. El ión - molécula de hidrógeno. Orbitales moleculares híbridos. Moléculas diatómicas homonucleares. Métodos para estimar orbitales moleculares. El método del enlace de valencia para la molécula de H_2 desarrollado por Heitler y London. El método CLOA. Moléculas diatómicas homonucleares. Moléculas diatómicas heteronucleares. Métodos ab-initio.

Electronegatividad relativa y absoluta. Escalas. Energías de ionización y electroafinidad. Electronegatividad y carácter iónico parcial de enlace.

UNIDAD III: TERMODINÁMICA ESTADÍSTICA.

Capítulo 1:

Las limitaciones de la Termodinámica clásica. El valor de C_p/C_v para gases mono, di y poliatómicos. El auxilio de las teorías moleculares. La Teoría cinética del gas ideal monoatómico. La distribución de las velocidades. Cálculo de α y β . La función error. Función de distribución de la energía. Principio de equipartición de la energía. Teoría clásica de las capacidades caloríficas.

La estadística de Maxwell – Boltzmann y sus dificultades La estadística de Bose - Einstein. La estadística de Fermi - Dirac.

Capítulo 2.

Los métodos de la Termodinámica Estadística Conjuntos y postulados. El método de Gibbs. Ensamble canónico y Termodinámica. Ensamble gran canónico. Ensamble microcanónico. Fluctuaciones. Equivalencia termodinámica de los ensambles. Funciones termodinámicas en términos de la función de partición. Función de partición molecular. Potencial químico de un componente en una mezcla gaseosa ideal. La función de partición de un gas monoatómico. Función de partición de vibración. Función de partición y capacidad calorífica de un sólido monoatómico. La función de partición rotacional. La función de partición electrónica. Orto y para - hidrógeno

UNIDAD IV: ELECTROQUÍMICA

Capítulo 1:

Elementos galvánicos. F.e.m. y su medición. Pila reversible. Electrodo reversible. Reacciones en pilas reversibles. Energía libre y f.e.m. Potencial de electrodo. Formas de expresión. Electroodos de referencia. Potenciales estándar de oxidación. Influencia de la concentración en el potencial de electrodo. Pilas de concentración con y sin transporte. Determinación de actividades y coeficientes de actividad. Potencial de descomposición. Procesos catódicos y anódicos. Polarización electrolítica. Aplicaciones: El proceso Hall - Heroult para la obtención del aluminio.

UNIDAD V. FISICOQUÍMICA DE SUPERFICIES

Capítulo 1:

Superficie, interfaz e interfase. Importancia de las interfases. Interfase líquido - gas. Energía libre interfacial. Variación de la tensión superficial con la temperatura y la presión. Ecuación de Young - Laplace. Capilaridad. Ecuación de Kelvin. Tensión superficial de soluciones. Agentes tensioactivos. Determinación de la tensión superficial. Tensión de interfacial entre dos líquidos. Adhesión y cohesión.

La ecuación de adsorción de Gibbs. Exceso interfacial relativo. Películas superficiales. Estado “físico” de las capas monomoleculares. Adsorción de sólidos. Adsorción de gases.

Fenómenos eléctricos en las interfases. Doble capa eléctrica. Efectos electrocinéticos.

Capítulo 2:

El estado coloidal. Preparación de dispersiones coloidales. Purificación de las dispersiones coloidales. Propiedades ópticas de los soles. Movimiento browniano. Propiedades eléctricas de los soles hidrófobos. Precipitación de coloides por electrolitos. Propiedades eléctricas de los soles liófilos, viscosidad y electroforesis. Estabilidad de los soles liófilos. Geles. Emulsiones.

UNIDAD VI: CINÉTICA QUÍMICA**Capítulo 1:**

Velocidad de reacción. Medida de la velocidad de reacción. Análisis de los resultados experimentales. Factores que influyen en la velocidad de una reacción química. Reacciones químicas en sistemas homogéneos. Orden y molecularidad. Reacciones simples y compuestas. Reacciones de primer orden. Reacciones de segundo orden. Degeneración del orden. Reacciones de pseudo primer orden. Reacciones de tercer orden. Reacciones que se producen en etapas. Determinación del orden de reacción. Reacciones compuestas. Reacciones de equilibrio u opuestas. Reacciones paralelas. Reacciones consecutivas. Reacciones en cadena. Fisión nuclear. Reacciones homogéneas en fase líquida. Efecto de la temperatura sobre la velocidad de reacción. Velocidad de reacción y teoría del complejo activado. Reacciones en soluciones de electrolitos. Efecto salino.

Capítulo 2:

Catálisis. Catálisis ácido – base. Relaciones de Brønsted. Catálisis enzimática. Relojes químicos. La reacción de Belousov – Zhabotinsky. La reacción de Briggs – Rauscher. El brusselator. El oregonator. Estructuras disipativas. Reacciones oscilantes en sistemas biológicos.

Bibliografía para los alumnos

- Alberty, R. A., - Daniels, F.** *Fisicoquímica Versión SI*. C.E.C.S.A. México. 1984.
Atkins P.W., *Fisicoquímica*. Addison - Wesley Iberoamericana. Willmington. 1986.
Atkins P.W., *Physical Chemistry*. 6th. edition. W.H. Freeman Company. San Francisco. 1997
Castellan, G.W. *Físicoquímica*. 3a. edición Addison - Wesley Iberoamericana. México 1987.
Glasstone, S., *Termodinámica para Químicos*. 7a. edición. Aguilar S.A. de Ediciones. Madrid. 1974
Glasstone, S., *Tratado de Química Física*. 5a. edición. Aguilar S.A. de Ediciones. Madrid. 1969.
Guerasimov, Y.A. – Dreving, V. – Eriomin, E. – Kiseliov, A. Lebedev, V – Panchenkov, G. – Shliguin, A. *Curso de Química Física*. Tomos 1 y 2. 4ª. edición. Ed. Mir. Moscú. 1986
Isnardi, T. *Termodinámica*. EUDEBA. Bs. Aires. 1972.
Laidler, K.J. - Meiser, J. H. *Fisicoquímica*. 2a. edición. C.E.C.S.A. México. 1997.
Levine, I. *Química Cuántica*. 5a. edición. Prentice Hall. Madrid. 2001

Bibliografía para la realización de trabajos prácticos

- Daniels, F., Williams, J.W., Bender, P., Alberty, R.A., Cornwell, C.D.,** *Experimental Physical Chemistry*. 6th. Ed. McGraw - Hill Book Company. New York. 1962.
Palmer, W.G., *Experimental Physical Chemistry*. 4th. Ed. Cambridge University Press. London. 1982.
Ewing, G.W., *Métodos Instrumentales de Análisis Químicos*. McGraw - Hill de México S.A. de C.V. México. 1978
Burmistrova, O. A. y otros. *Prácticas de Química Física*. Ed. Mir. Moscú. 1977

Findlay, A. Kitchener, J.A. *Prácticas de Físicoquímica*. Ed. Médico Quirúrgica. Bs. Aires. 1955.

MODALIDAD DE TRABAJO: Presencial, interactiva, teórico - práctica

RÉGIMEN DE PROMOCIÓN

Con examen final

Para estar en condiciones de rendir el examen final el alumno deberá cumplir con la reglamentación vigente en cuanto a la asistencia; aprobar los trabajos de laboratorio, cuya evaluación será oral o escrita a elección del alumno y se efectuará previa a la realización de cada trabajo.

En cuanto al **régimen para alumno libre**, el alumno deberá adecuarse al “Reglamento de alumno libre” vigente para todas las carreras. En el caso particular de esta asignatura, el alumno inscripto como “alumno libre” — debido al tiempo que insume la realización de los trabajos de laboratorio, — sólo podría rendir examen en aquellas fechas en que hay doble turno. En el primer turno, deberá rendir un examen de la parte práctica de la materia consistente en la realización de dos trabajos de Laboratorio y la resolución de tres problemas de aplicación de los contenidos de la asignatura. Aprobada la parte práctica estará en condiciones de rendir la parte teórica de la asignatura en la segunda fecha.

Dr. Miguel Katz M. Sc.