



UNIVERSIDAD POLITÉCNICA DE MADRID
ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR
DE
INGENIEROS DE MINAS

Ríos Rosas, 21
28003 MADRID.

DEPARTAMENTO DE
INGENIERÍA QUÍMICA Y COMBUSTIBLES

PROGRAMA DE LA ASIGNATURA

QUÍMICA FÍSICA

Curso : 3º
Cuatrimestre : 2º
Carácter : Optativa

Créditos totales
Teóricos : 2
Prácticos : 2,5

PLAN DE ESTUDIOS 1996

Edición 2: 2000-02-08

QUÍMICA FÍSICA: PROGRAMA

a) OBJETIVOS Y CONTENIDOS

BLOQUE 1: Termodinámica estadística

OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- 1.1 Comprender los conceptos básicos manejados por la Mecánica Estadística.*
- 1.2 Interpretar estadísticamente los conceptos de irreversibilidad, espontaneidad y equilibrio.*
- 1.3 Desarrollar los modelos estadísticos utilizados en Física.*
- 1.4 Establecer la conexión entre la Mecánica Estadística y la Termodinámica.*
- 1.5 Aplicar la Mecánica Estadística a la determinación de propiedades termodinámicas.*
- 1.6 Aplicar el Tercer Principio de la Termodinámica a la determinación de entropías.*

CONTENIDOS

1.1: NOCIONES FUNDAMENTALES

- Estados cuánticos, microestados y distribuciones.
- Entropía y desorden.
- Entropía, irreversibilidad, espontaneidad y equilibrio.
- Aplicación a los cambios de fase y reacciones químicas.

1.2: MODELOS ESTADÍSTICOS

- Introducción.
- El problema de la discernibilidad.
- Modelo de Bose-Einstein.
- Utilización de una escala logarítmica. Aproximación de Stirling.
- Distribución más probable.
- Fluctuaciones.
- Otros modelos estadísticos. Límite clásico.

1.3: TERMODINAMICA ESTADISTICA

- Postulado de Boltzmann.
- Conexión con la Termodinámica Clásica.
- Función de partición.
- Expresiones estadísticas de las funciones de estado.
- Formulación estadística del equilibrio químico.

1.4: TERCER PRINCIPIO DE LA TERMODINAMICA

- Cálculo de entropías.
- Modelo cristalino.
- Entropías en el cero absoluto.

- Entropías según el Tercer Principio.
- Inaccesibilidad del cero absoluto.

BLOQUE 2: Química de superficies y sistemas dispersos

OBJETIVOS ESPECIFICOS

- 2.1 Reconocer las situaciones que requieren el estudio de las interfases.*
- 2.2 Aplicar la isoterma de adsorción de Gibbs e interpretar los resultados.*
- 2.3 Reconocer los diversos tipos de adsorción.*
- 2.4 Aplicar las isotermas de adsorción de Langmuir y de Freundlich.*
- 2.5 Comprender las peculiaridades eléctricas de las interfases y desarrollar sus consecuencias.*
- 2.6 Reconocer los diversos tipos de sistemas dispersos, sus peculiaridades y propiedades.*
- 2.7 Comprender las propiedades eléctricas de los soles.*
- 2.8 Discutir la estabilidad de las fases dispersas.*
- 2.9 Describir las peculiaridades reológicas de los sistemas dispersos.*

CONTENIDOS

2.1: QUIMICA DE SUPERFICIES

- Características de las interfases. Adsorción.
- Energía y tensión superficial.
- Termodinámica de las interfases. Isoterma de adsorción de Gibbs.
- Adsorción de gases por sólidos. Isoterma de Langmuir.
- Adsorción de solutos. Isoterma de Freundlich.
- Fenómenos eléctricos en las interfases.

2.2: SISTEMAS DISPERSOS

- Introducción.
- Conceptos fundamentales y clasificación.
- Suspensiones, emulsiones, coloides, soles y geles.
- Solvatación y estabilidad.
- Fenómenos reológicos.

BLOQUE 3: Cinética Química y catálisis

OBJETIVOS ESPECIFICOS

- 3.1 Comprender los conceptos de velocidad de reacción, orden de reacción, constante de velocidad, mecanismo, complejo activado y molecularidad.*
- 3.2 Aplicar la ley de Arrhenius y determinar sus parámetros.*
- 3.3 Formular la teoría del complejo activado y discutir la significación de sus parámetros.*
- 3.4 Aplicar la teoría del complejo activado al análisis de la cinética de reacciones iónicas.*
- 3.5 Comprender la activación fotoquímica y los procesos a que da lugar.*
- 3.6 Analizar la cinética de reacciones irreversibles, reversibles, consecutivas y simultáneas sencillas.*
- 3.7 Analizar la cinética de reacciones en cadena sencillas.*

3.8 Analizar e interpretar los diversos mecanismos de reacciones explosivas.

3.9 Comprender el mecanismo básico de la catálisis.

3.10 Analizar reacciones catalíticas homogéneas.

3.11 Analizar reacciones catalíticas heterogéneas gas-sólido.

CONTENIDOS

3.1: FUNDAMENTOS DE LA CINÉTICA QUÍMICA

- Conceptos fundamentales.
- Ley de Arrhenius. Energía de activación.
- Teoría del complejo activado.
- Cinética de reacciones iónicas. Efecto salino primario.
- Cinética de reacciones simples.
- Activación fotoquímica.

3.2: CINÉTICA FORMAL

- Reacciones de primer y segundo orden.
- Período de semirreacción.
- Reacciones opuestas.
- Reacciones consecutivas.
- Reacciones simultáneas.
- Reacciones en cadena.
- Reacciones explosivas.

3.3: CATALISIS QUÍMICA

- Conceptos fundamentales y mecanismo básico.
- Catálisis homogénea.
- Catálisis ácido-base. Efecto salino secundario.
- Catálisis heterogénea.
- Catalizadores sólidos.

BLOQUE 4: Fenómenos electrolíticos

OBJETIVOS ESPECÍFICOS

4.1 Analizar la reversibilidad e irreversibilidad de los procesos electrolíticos.

4.2 Comprender el concepto de sobretensión y distinguir sus tipos.

4.3 Analizar la cinética electroquímica y formular la sobretensión de activación.

4.4 Comprender la pasividad electroquímica.

4.5 Comprender el concepto de corrosión y distinguir y analizar sus diversos tipos.

4.6 Comprender los métodos para la prevención de la corrosión.

CONTENIDOS

4.1: CONCEPTOS FUNDAMENTALES

- Procesos electrolíticos.

- Efectos irreversibles.
- Polarización y sobretensión.

4.2: CINÉTICA ELECTROQUÍMICA

- Sobretensión de activación. Ecuaciones de Butler-Volmer y de Tafel.
- Corriente de intercambio. Reversibilidad de los electrodos.

4.3: APLICACIONES

- Pasividad.
- Corrosión. Tipos y mecanismos. Prevención.

b) BIBLIOGRAFÍA

BÁSICA:

- ATKINS, P.W., 1991. Físicoquímica. 3ª ed. Ed. Addison -Wesley.
- CASTELLAN, G.W., 1987. Físicoquímica. 2ª ed. Ed. Addison-Wesley.
- HERNANDEZ DE LOPE, J.M., CAMARA, A. y GARCIA TORRENT, J., 2000. Prácticas de Laboratorio de Química Física. Ed. Fundación Gómez-Pardo. (TEXTO)
- LEVINE, I.N., 1993. Físicoquímica. 3ª ed. Ed. McGraw-Hill.
- MONTES, J.M., HERNÁNDEZ DE LOPE, J.M., GARCIA TORRENT, J. y CAMARA, A., 2000. Química Física. Ed. Fundación Gómez-Pardo. (TEXTO)

COMPLEMENTARIA:

- BOWLEY, R. y SANCHEZ, M., 1996. Introductory Statistical Mechanics. Ed. Oxford University Press.
- HAMANN, C.H. et al., 1998. Electrochemistry. Ed. Wiley-VCH.
- NOGGLE, J.H., 1985. Physical Chemistry. Ed. Little, Brown and Co..
- PILLING, M.J., et al., 1995. Reaction Kinetics. 2ª ed. Ed. Oxford University Press.
- SHAW, D.J., 1992. Introduction to Colloid and Surface Chemistry. 4ª ed. Ed. Butterworths.

Nota: Existe una amplia videoteca sobre temas de la Asignatura a disposición de los alumnos en la Biblioteca de la Escuela.

c) PRACTICAS EN GRUPOS REDUCIDOS

Nº de prácticas por curso y alumno: 3

Nº de alumnos por grupo: 30 (máximo)

Relación de contenidos:

Práctica Nº 1: Química de superficies.

" Nº 2: Cinética química.

" Nº 3: Electrólisis.

Lugar de realización:

Laboratorio de Química Física
en todas las prácticas

d) PROCEDIMIENTO DE EVALUACION

La evaluación no se limita a considerar la mera reproducción de contenidos, sino que se centra sobre la capacidad de aplicación de los conceptos y recursos expuestos en las clases y en el texto.

Las prácticas de laboratorio se califican por evaluación continuada a lo largo del curso. Los alumnos que no la superen podrán someterse, si lo desean, a una prueba final de laboratorio. El aprobado de las prácticas de laboratorio es indispensable para la admisión al examen final de la asignatura.

El examen consta de las dos partes siguientes, de igual peso:

- 1) Varias cuestiones breves, que requieren aplicar la teoría impartida, pero no precisan de la memorización de contenido alguno.
- 2) Varios problemas de aplicación, de idénticas características que los propuestos y resueltos durante el curso.

Los alumnos disponen de unas tablas y formularios que incluyen todas las constantes, valores y fórmulas que puedan necesitar.

Durante el curso y en horas normales de clase se realizan pruebas aleatorias de evaluación continuada, sin previo aviso, sobre la materia del día y los inmediatamente anteriores. Con los resultados de estas pruebas y con la calificación de las prácticas de laboratorio se obtiene un factor de mejora, comprendido entre 1,00 y 1,20, que se aplica a la nota del examen.

Finalmente, las calificaciones de los alumnos que han resultado aprobados se someten a un proceso de ajuste, siempre por exceso, para aproximar su distribución a las usuales en el ECTS (Sistema Europeo de Transferencia de Créditos).