UNIVERSIDAD DE JAÉN

**TITULACIÓN: LICENCIADO EN QUÍMICA**

**CURSO ACADÉMICO: 2008-2009**

**GUÍA DOCENTE de FUNDAMENTOS DE QUÍMICA FÍSICA**

**EXPERIENCIA PILOTO DE IMPLANTACIÓN DEL SISTEMA DE CRÉDITOS EUROPEOS EN LA UNIVERSIDAD DE JAÉN.**
**UNIVERSIDADES ANDALUZAS**

## DATOS BÁSICOS DE LA ASIGNATURA

| | | |
|---|---|---|
| NOMBRE: **Fundamentos de Química Física** | | |
| CÓDIGO: 3973 | AÑO DE PLAN DE ESTUDIOS: 1995 (Adap. 2000) | |
| TIPO: Obligatoria | | |
| Créditos LRU / ECTS totales: **4,5/3,8** | Créditos LRU/ECTS teóricos: **3,0/2,5** | Créditos LRU/ECTS prácticos: **1,5/1,3** |
| CURSO: **1º** | CUATRIMESTRE: **2º** | CICLO: **1º** |

## DATOS BÁSICOS DEL PROFESORADO

| | | |
|---|---|---|
| NOMBRE: Juan Jesús López González y Francisco Partal Ureña | | |
| CENTRO/DEPARTAMENTO: Facultad de Ciencias Experimentales/Química Física y Analítica | | |
| ÁREA: Química Física | | |
| Nº DESPACHO: 123 y 112 | E-MAIL: jjlopez@ujaen.es y fpartal@ujaen.es | TF: 953/212754 y 953/212555 |
| URL WEB: www4.ujaen.es/~jjlopez y www4.ujaen.es/~fpartal | | |

## DATOS ESPECÍFICOS DE LA ASIGNATURA

**1. DESCRIPTOR**

Introducción a la Química Física y a la Termodinámica Química. Las leyes de la Termodinámica y sus aplicaciones básicas a la Química (Termodinámica Química): Termoquímica, los potenciales termodinámicos y el equilibrio material (el potencial químico), las entropías y energías libres normales de reacción, las propiedades molares parciales y la ecuación de Gibbs-Duhem y la ley de las fases y los cambios de fases en sistemas unicomponentes.

UNIVERSIDAD DE JAÉN

## 2. SITUACIÓN

### *2.1. PRERREQUISITOS:*

Manejar con suficiente soltura las bases de conocimientos, habilidades y destrezas de Matemáticas, Física y Química necesarias que debe haber estudiado en las asignaturas de tales materias durante el 1º cuatrimestre del curso y en sus estudios previos a su llegada a la licenciatura de Química.

### *2.2. CONTEXTO DENTRO DE LA TITULACIÓN:*

Con esta asignatura en el 2º cuatrimestre del 1º curso de la licenciatura se pretende introducir al estudiante en los principios básicos para el estudio macroscópico de los sistemas químicos y fisicoquímicos en equilibrio termodinámico, en los cuales continuará formándose en las asignaturas de química Física de cursos posteriores, tales como la Química Física II, y que le deben dar una formación sólida para aplicar los conocimientos, habilidades y destrezas adquiridas en el estudio e interpretación de las materias teóricas y prácticas de esta y otras ramas de la Química.

### *2.3. RECOMENDACIONES:*

Es fundamental para el desarrollo de esta asignatura que en la asignatura de Matemáticas se haya dado en el 1º cuatrimestre la parte de cálculo diferencial e integral y en la de Física la Termodinámica.

UNIVERSIDAD DE JAÉN

# 3. COMPETENCIAS

## *3.1. COMPETENCIAS TRANSVERSALES/GENÉRICAS:*

Instrumentales

1) Capacidad de análisis y síntesis de temas de un cierto nivel intelectual abstracto.
2) Capacidad de organización y planificación de las materias que se van a trabajar en el curso en cada cuatrimestre.
3) Comunicación oral y escrita en español de los conocimientos y destrezas adquiridas en el estudio y aprendizaje de las distintas materias del curso.
4) Conocimiento en las correspondientes lenguas extranjeras de los términos científicos y/o terminológicos de uso más común en las materias del curso.
5) Conocimientos de informática relativos al ámbito de los asuntos administrativos y las materias de estudio del curso.
6) Capacidad de gestión de la Información relacionada con los asuntos administrativos y de las materias del curso.
7) Resolución de problemas relacionados con las materias del curso.
8) Toma de decisiones en todo lo que concierna al desarrollo del curso.

Personales

1) Capacidad de trabajo dentro de un equipo con compañeros del curso sobre materias de la asignatura.
2) Capacidad de trabajo dentro de un equipo con compañeros del curso (y/o de otros cursos y/o titulaciones) sobre materias de carácter interdisciplinar.
3) Habilidades en las relaciones interpersonales.
4) Capacidad de reconocimiento de la diversidad y la multiculturalidad, en el contanto y trato con estudiantes, profesores y personal de la universidad y de fuera de ella de otros lugares y/o razas.
5) Capacidad de razonamiento crítico, tanto científico como de la realidad que le rodea y de los hechos socio-culturales que ocurren a su alrededor.
6) Compromiso ético con los valores y la realidad de su entorno y de la sociedad, tanto a nivel local, provincial, regional, nacional e internacional.

Sistémicas

1) Aprendizaje autónomo.
2) Adaptación a nuevas situaciones.
3) Creatividad.
4) Conocimiento de otras culturas y costumbres.
5) Iniciativa y espíritu emprendedor.
6) Motivación por un aprendizaje con bases sólidas, científicas y de calidad.
7) Sensibilidad hacia temas medioambientales.

## *3.2. COMPETENCIAS ESPECÍFICAS:*

- ***Cognitivas (Saber):***

- 1) Los orígenes esenciales, las partes constituyentes y la metodología de la Química Física.
- 2) Aspectos básicos y fundamentales de la terminología, nomenclatura, convenios y unidades usadas en Química y en Química Física, principalmente en Termodinámica y en Termodinámica Química.
- 3) Los conceptos básicos y el significado de las magnitudes trabajo y calor, sus convenios de signos y sus implicaciones en el estudio termodinámico de los sistemas químicos y fisicoquímicos.
- 4) Las leyes cero y primera de la termodinámica, sus significados e implicaciones para la Química y el estudio de los sistemas fisicoquímicos, así como el de las magnitudes de estado que cada una de ellas lleva asociada, esto es, temperatura y energía interna (o total) del sistema, respectivamente.
- 5) Los conceptos de entalpía y de capacidades caloríficas, con especial énfasis en aquellas a en procesos a presión y volumen constante, las ecuaciones que las ligan (incluyendo a la energía interna) y su interés en sistemas químicos y fisicoquímicos.
- 6) Los experimentos de Joule y el de Joule-Thomson en relación con la primera ley y con los conceptos de las funciones de estado energía interna (o total) y entalpía, así como su interés en sistemas químicos, fisicoquímicos y tecnológicos.
- 7) Conceptos, nomenclatura y convenios relacionados con el estudio termoquímico de las reacciones, las leyes termoquímicas y la de Kirchoff, acerca de la dependencia de los calores de reacción con la temperatura, así como la aplicación de estas al cálculo energético y de parámetros termoquímicos en aquellas.
- 8) La segunda ley de la Termodinámica, su significado e implicaciones para la Química y el estudio de los sistemas fisicoquímicos, así como el de la magnitud de estado entropía asociada a él y la aplicación de esta al establecimiento de las condiciones de reversibilidad, irreversibilidad y equilibrio en los procesos que ocurren en ellos.
- 9) Las funciones termodinámicas U, H, F y G, sus relaciones entre ellas y las ideas básicas de su aplicación al estudio macroscópico de los sistemas químicos y fisicoquímicos, particularmente al establecimiento de las condiciones de espontaneidad, reversibilidad y equilibrio en ellos.
- 10) El concepto de potencial químico y su uso e implicaciones en el estudio de los procesos con cambios materiales que ocurren en los sistemas químicos y fisicoquímicos multicomponentes.
- 11) La tercera ley de la Termodinámica, su significado e implicaciones para la Química y Química Física, particularmente en lo referente al cálculo de entropías relativas, y entropías y energías libres normales de reacción.
- 12) El concepto, significación, utilidad y métodos de cálculo de propiedades molares parciales de las magnitudes extensivas en los sistemas químicos y fisicoquímicos multicomponetes, así como la ecuación de Gibbs-Duhem, su relevancia y las bases de su aplicabilidad a la Termodinámica Química de sistemas de varios componentes.
- 13) Propiedades fundamentales de los diferentes estados de la materia, conceptos básicos en el estudio de la ley de las fases y los cambios de fases y el establecimiento de dicha ley, así como su aplicación y las leyes que rigen para los cambios de fases de primer orden en sustancias puras, y la aplicación de estas a los cálculos de curvas de presiones de vapor.

- ***Procedimentales/Instrumentales (Saber hacer):***

- 1) Capacidad para demostrar el conocimiento y comprensión de los conceptos, principios, teorías y hechos básicos fundamentales de la Termodinámica, y su aplicación a la Química, en los aspectos señalados en el apartado anterior.
- 2) Resolución de cuestiones teórico-prácticas cualitativas y cuantitativas y problemas de cálculo numérico, según modelos previamente desarrollados, relativos a las materias indicadas en el apartado anterior.

- ***Actitudinales (Ser):***

- 1) Responsable en el estudio y trabajo individual y en equipo.
- 2) Responsable en el trato con el material e infraestructuras propias y ajenas.
- 3) Honesto consigo mismo y con otras personas (compañeros, profesores, etc).
- 4) Honesto en la crítica y autocrítica relacionada con su aprendizaje y con su vida.
- 5) Una persona abierta a la escucha y el aprendizaje, así como a la comprensión y generación de nuevas ideas.

UNIVERSIDAD DE JAÉN

# 4. OBJETIVOS

- 1) Explicar sucintamente, a modo de introducción, los orígenes, las partes constituyentes, la metodología y el lugar actual de la Química Física entre las diferentes ramas de la Química y de las Ciencias Experimentales.

- 2) Asentar los conceptos, terminología, nomenclatura, convenios y unidades (principalmente las del SI) básicos de la Termodinámica (del equilibrio) para el estudio macroscópico de los sistemas químicos y fisicoquímicos, con especial énfasis en aquellos relativos a las materias del programa de la asignatura.

- 3) Asentar las leyes cero, primera y segunda de la Termodinámica, explicando razonadamente algunos aspectos relativos a las mismas (o relacionados con ellas) que ayuden a reforzar y consolidar las ideas generales de su importancia en las ciencias y en la vida (por ejemplo, los conceptos de magnitudes extensivas e intensivas, calor, trabajo y energía interna, funciones de estado y funciones de línea, diferencial exacta de una función, reversibilidad e irreversibilidad de procesos, etc ), y en particular en el estudio de los sistemas químicos y fisicoquímicos.

- 4) Relacionar las magnitudes de estado temperatura (T), energía interna (U) (o total, E) y entropía (S) con cada uno de los principios de la Termodinámica a los que van asociados, y asentar el significado e importancia de esas magnitudes y relaciones.

- 5) Definir el concepto de función de estado entalpía (H =U + PV) y establecer su relación con el calor puesto en juego en procesos a presión constante y los casos en los que la capacidad calorífica de un sistema a presión constante ($C_p$) puede escribirse en función de ella, de forma similar al caso de $C_v$ Y U (o E); resaltar asimismo el hecho de que H tiene dimensiones y, por tanto, unidades de energía.

- 6) Aplicar la expresión matemática de la primera ley de la Termodinámica, así como las expresiones de $C_p$ y $C_v$ en función de H y U (o E), respectivamente, y de la ecuación de estado del sistema, para determinar los valores de w, q, ΔU y ΔH en procesos termodinámicos isotermos, isóbaros, isocoros y adiabáticos, con especial énfasis en el caso de sistemas formados por un gas perfecto.

- 7) Explicar (o asentar, en el caso del primero)los experimentos de Joule (sobre la expansión libre de un gas) y de Joule-Thomson e introducir las definiciones de los coeficientes $\mu_J$ y $\mu_{JT}$ (y de la temperatura de inversión de un gas relacionado con él), asociados con ellos, dando cuenta de (o asentando en el caso del primero) su importancia histórica y sus aplicaciones a sistemas de interés químico, fisicoquímicos y tecnológicos.

- 8) Establecer la relación $C_p - C_v$ en una forma general para cualquier fase pura y derivar su aplicación para el caso del gas ideal y de un gas tipo virial.

- 9) Consolidar las definiciones de los coeficientes de expansión térmica isobárica (α) y de compresibilidad isotérmica (β), explicar su importancia en la determinación de parámetros y magnitudes termodinámicas de interés químico y fisicoquímico, algunas de ellas poco accesibles o inaccesibles a su determinación experimental directa, y aplicarlos, por ejemplo, en determinaciones de $C_v$, $\mu_J$ y $\mu_{JT}$.

- 10) Asentar (o Introducir, según el caso) los conceptos de calor de reacción (a P y/o V constante), los convenios y nomenclatura básicos de la termoquímica de reacciones y sus ecuaciones, las leyes termoquímicas (Lavoisier-Laplace y Hess), los conceptos de calores normales (o estandar) de formación, calores de combustión y energías de enlace en termoquímica.

- 11) Establecer las relaciones entre $Q_p$ y $Q_v$, según el tipo de fases en la que se encuentren reactivos y productos de la reacción, y las ecuaciones de Kirchoff para la dependencia de Qp y Qv con T, en forma integral y diferencial, y aplicarlas al cálculo de los calores de reacción a una temperatura conocidos a otra diferente. Asimismo, aplicar la termoquímica al cálculo de la temperatura de una llama y la temperatura y presión de una explosión de gases.

- 12) Definir las funciones de estado energías libres de Helmholtz (F) y Gibbs (G) y usarlas para el establecimiento de las condiciones de espontaneidad y equilibrio en los sistemas cerrados en procesos a V y T y a P y T constantes, respectivamente, partiendo del criterio entrópico (2ª ley), y la determinación de los trabajos total (isotermos) y útil máximos (isotermos e isóbaros), respectivamente, en ellos.

- 13) Establecer las variables de estado propias de cada potencial (función) termodinámico U (o E), H, F y G, así como las ecuaciones de Gibbs y las relaciones de Maxwell en sistemas cerrados sin procesos de cambios materiales en ellos, formulando las ecuaciones básicas del método de Gibbs para el estudio de las propiedades termodinámicas de los sistemas.

- 14) Definir el concepto de potencial químico de una sustancia, en general, en sistemas polifásicos y multicomponentes, usando todas y cada una de las funciones termodinámicas del punto anterior, y aplicarlo al establecimiento de las ecuaciones de Gibbs en sistemas cerrados y abiertos con procesos (reversibles o no) de cambios materiales en ellos, así como al establecimiento general de la condición de equilibrio en los primeros, particularizándola a los casos de equilibrios en los procesos de cambios de fases y al equilibrio químico en sistemas reactivos.

- 15) Derivar la ecuación de Gibbs-Helmholtz y aplicarla al análisis de la dependencia de la función de Gibbs con la temperatura.

- 16) Establecer la tercera ley de la Termodinámica, y aplicarla al cálculo de entropías relativas, y entropías y energías libres normales de reacción.

- 17) Definir el concepto de propiedad molar parcial de una magnitud extensiva para los componentes de una mezcla (o disolución), visualizarla con ejemplos sencillos, diferenciándola claramente de la correspondiente propiedad molar del componente puro, expresar dicha magnitud extensiva en función de sus valores molares parciales para los diferentes componentes de la mezcla (o disolución) y establecer la ecuación de Gibbs-Duhem que relaciona entre si a los potenciales químicos (o propiedad molar parcial de la que se trate) de los diferentes componentes de una disolución a una determinada presión y temperatura.

- 18) Explicar los métodos más usados en la determinación de propiedades molares parciales y aplicarlos a casos concretos de su determinación tanto para valores absolutos (por ejemplo, volúmenes) como relativos (por ejemplo, calores diferenciales de disolución) de magnitudes extensivas.

- 19) Definir los conceptos básicos para el establecimiento de la ley de las fases de Gibbs para sistemas polifásicos y multicomponentes en equilibrio y formularla razonadamente tanto en sistemas no reactivos como en aquellos reactivos.

- 20) Dibujar e interpretar diagramas de fases para sistemas monocomponentes ($H_2O$, $CO_2$, C, He), con ayuda de la expresión particular de la ley de las fases para ellos.

- 21) Definir el concepto de cambio de fase de primer orden en sistemas monocomponentes, deducir la ecuación de Clapeyron que los rige y, a partir de ella, la de Clausius-Clapeyron para los cambios de fase sólido-gas y líquido-gas, aplicando esta última al cálculo de las curvas de presión de vapor de sólidos y líquidos.

## 5. METODOLOGÍA

***NÚMERO DE HORAS DE TRABAJO DEL ALUMNO:*** **95**

**SEGUNDO CUATRIMESTRE:**

Nº de Horas: ……**95,0**

- Clases Teóricas: (Expositivas temario prog)……**24,0**
- Clases Prácticas: (Resoluc prob y ejerc modelos)……**12,0**
- Exposiciones y Seminarios: (Introd herramient fisicomatemát básicas)…….. …**3,0**
- Tutorías Especializadas (presenciales o virtuales):
  - A) Colectivas: (Sesión de presentación prof, fich, prog, metod, crite eval, biblio (1h), sesiíon de resoluc ejerc autoeval (1h) y sesión de resolución de ejercicios de actividades académicamente dirigidas individuales (1h)……**3,0**
  - B) Individuales:(atención, rev ejerc autoeval, ejerc académ dirig y exam)…. **1,0**
- Realización de Actividades Académicas Dirigidas:
  - A) Con presencia del profesor: (Realiz Ejerc cuest y problem individ (1h), y cuestionario de seguimiento del desarrollo de la experiencia en esta asignatura y en general en el curso (0,5h)……**1,5**
- Otro Trabajo Personal Autónomo:
  - A) Horas de estudio……:…….**42,0**
  - B) Preparación de Trabajo Personal: (Autoev Problem y Ejerc propu)……**4,5**
- Realización de Exámenes:
  - A) Examen escrito: ……**4,0**

UNIVERSIDAD DE JAÉN

**6. TÉCNICAS DOCENTES** (señale con una X las técnicas que va a utilizar en el desarrollo de su asignatura. Puede señalar más de una. También puede sustituirlas por otras):

| | | |
|---|---|---|
| Sesiones académicas teóricas: X | Exposición y debate: X | Tutorías especializadas: X |
| Sesiones académicas prácticas: X | Visitas y excursiones: X | Resolución de ejercicios en forma individual y en grupos clase: X |

## DESARROLLO Y JUSTIFICACIÓN:

- En las sesiones académicas teóricas, se utilizará fundamentalmente la exposición, y en una medida prudente, que las ocasiones así lo aconsejen (algunas de las cuales estarán previstas de antemano), la interacción pregunta-respuesta del profesor hacia el estudiante, y viceversa (si así se llegase a plantear), pudiendo provocarse de este modo ocasiones y situaciones de debates constructivos, que podrían extenderse, procurando que lo fuese de una manera controlada, entre los propios estudiantes. Este mismo método se aplicará en las sesiones de seminarios, que se dedicarán a introducir y/o asentar (según la práctica lo indique) las herramientas fisicomatemáticas básicas e imprescindibles para el buen desarrollo de la asignatura (2,5 h). La participación activa y positiva del estudiante en estos debates y en la resolución de pequeños ejercicios que se les plantearán a raíz de los mismos, en clase o bien fuera de ella, se les contabilizará adicionalmente a la hora de su calificación final en la asignatura.

- En las sesiones académicas prácticas, se plantearán y resolverán modelos de problemas numéricos y ejercicios y cuestiones teórico-prácticas relacionados con las materias de la asignatura, procurando la participación activa de los estudiantes. Para ello, se les entregarán con suficiente antelación a los estudiantes los enunciados de los problemas, ejercicios y cuestiones, que se procurará puedan resultar motivadores por su propio contenido e incentivando el que procuren abordarlos por ellos mismo, antes de su resolución en clase por parte del profesor, planteando el que en algunos casos concretos se les revisarán y podrán otorgárseles puntuaciones que puedan sumar adicionalmente a la hora de su calificación final en la asignatura.

- En las sesiones de tutorías especializadas, por una parte se hará la presentación del profesor (nombre y apellidos, dirección en el campus y a través de vía electrónica, horario de clases, seminarios y tutorías colectivas e individuales con presencia física, etc), de la asignatura (programa, metodología, incluyendo clases teóricas y prácticas, seminarios, tutorías colectivas e individuales, actividades académicamente dirigidas, autoevaluaciones, exámenes, criterios de evaluación, bibliografía, etc) (1h), y por otra, se resolverán las cuestiones y ejercicios planteados en la autoevaluación prevista (1h) y en las sesión individual de actividades académicas dirigidas (1h) en el apartado (5) de metodología y distribución temporal de actividades.

- En las actividades académicamente dirigidas se plantearán ejercicios teórico-prácticos (cuestiones) y problemas numéricos para ser trabajados de manera individual por cada estudiante (1h), a modo de ejercicio de evaluación, con la presencia y control del profesor; asimismo, se pasará un cuestionario de seguimiento del desarrollo de la experiencia en esta asignatura y, en general, en el curso, (0,5 h).

- En la autoevaluación se plantearán cuestiones teórico-prácticas y/o en forma de test, y ejercicios de resolución numérica relacionas con las materias que se han tratado durante las clases teóricas y prácticas, seminarios y actividades docentes dirigidas. El ejercicio de autoevaluación se le entregará por escrito a los estudiantes quienes deberán responder a él, mediante 1h de trabajo individual (personal) de las 4,5 h contempladas como trabajo personal autónomo. Las otras 3,5 h la dedicaran a la preparación de las sesiones de ejercicios individuales, así como de aquellos ejercicios y problemas que, como antes se ha mencionado, se plantearán en clase, y que podrán ser evaluados adicionalmente.

## 7. BLOQUES TEMÁTICOS

A) Química Física y Termodinámica Química: La Química Física como ciencia y Las leyes cero y primera de la Termodinámica en Química y Química Física.

1. Iniciación a la Química Física e Introducción a la Termodinámica Química. Ley cero de la

Termodinámica.

2. Aspectos de interés químicos y químico físicos de la primera ley de la Termodinámica y de sus magnitudes de estado asociadas energía interna, U, (o total E) y entalpía, H, y sus aplicaciones al estudio de los gases.

3. La Termoquímica de las reacciones como una aplicación de la primera ley.

B) Química Física y Termodinámica Química: Las leyes segunda y tercera de la Termodinámica en química y Química Física:

4. Aspectos de interés químico y químico físicos de la segunda ley de la Termodinámica y de su magnitud de estado asociada entropía, S, y sus aplicaciones al establecimiento del criterio entrópico de irreversibilidad, reversibilidad y equilibrio en los sistemas termodinámicos.

5. La segunda ley y los cambios materiales en los sistemas termodinámicos. Él método de Gibbs de los potenciales termodinámicos para el estudio de los sistemas y su uso para el establecimiento de los criterios de espontaneidad y equilibrio en los mismos.

6. La tercera ley de la termodinámica y su aplicación a la determinación de entropías relativas y de entropías y energías libres normales de reacción.

C) Termodinámica Química: Introducción al estudio de los sistemas multicomponentes, a la ley de las fases y a su aplicación para el estudio de los cambios de fase de primer orden.

7. Termodinámica de los sistemas multicomponentes. Magnitudes molares parciales.

8. Ley de las fases de Gibbs. Termodinámica de los cambios de fases en sistemas unicomponentes.

# 8. BIBLIOGRAFÍA

## *8.1 GENERAL*

***8.1 GENERAL***

1) Textos de Teoría:


- A.W. Adamson, "Química Física", Reverté, Barcelona, 1999.
- P.W. Atkins y J. De Paula, "Fisicoquímica", 8ª edición, Panamericana, Madrid, 2008.
- D.W. Ball, "Fisicoquímica", Paraninfo, Madrid, 2004.
- G.M. Barrow, "Química Física", vols I y II, Reverté, Barcelona, 1988.
- J Bertran y J. Nuñez (Coords.), "Química Física ", vols I y II, Ariel Ciencia, Barcelona, 2002.
- G.W. Castellan, "Fisicoquímica", Fondo Educativo Interamericano, Bogotá (Colombia), 1997.
- R. Chang, "Fisicoquímica", Mac Graw Hill, Madrid, 2008.
- K. Denbigh, "Equilibrio Químico", AC, Madrid, 1981.
- M. Díaz Peña y A. Roig Muntaner, "Química Física", vols I y II, Alambra, Madrid, 1978.
- S. Glasstone, "Termodinámica para Químicos", Aguilar, Madrid, 1972.
- Ya Guerasimov y otros, "Curso de Química Física", Vols I y II, MIR Moscú (Rusia), 1980.
- I.M. Klotz y R.M. Rosemberg, "Termodinámica Química", AC, Madrid, 1978.
- K.J. Laidler y J.H. Meiser, "Fisicoquímica", CECSA, Mexico, 1998.
- I.N. Levine, "Fisicoquímica", vols 1 y 2, 5ª edición, Mc Graw Hill Interamericana, Madrid, 2004.


2) Textos de Problemas y Ejercicios:


- A.W. Adamson, "Problemas de Química Física", Reverté, Barcelona, 1975.
- M. Del Barrio Casado y cols., "Problemas Resueltos de Termodinámica", paraninfo, Madrid, 2005.
- V. Gandía, "Problemas de Termología", Soler, Valencia, 1977.
- L. C. Labowitz y J.S. Arents, "Fisicoquímica: Problemas y Soluciones", AC, Madrid, 1974.
- I.N. Levine, "Problemas de Fisicoquímica", 5ª edición, Mc Graw Hill, Madrid, 2005.
- C.R. Metz, "Fisicoquímica", 2ª edición, Mc Graw Hill, Bogotá (Colombia), 1991.
- A. Requena y A. Bastida, "Problemas Resueltos de Química Física. Termodinámica, Cinética y Electroquímica", paraninfo, 2008.
- J.J. Ruiz Sánchez, "Cuestiones de Termodinámica Química", 2ª edición , UCO, Córdoba, 1999.
- V. Soliakov, "Termodinámica Química", Paraninfo, Madrid, 1979.


## *8.2 ESPECÍFICA* (con remisiones concretas, en lo posible)

1) Textos:


- P.W. Atkins, "La segunda Ley", Prensa Científica S.A., Barcelona, 1992.
- K.J. Laidler, "The World of Physical Chemistry", OUP, Oxford, 1995.


2) Artículos en revistas científicas:


- H. Erlichson, "Internal energy in the first law of themodynamics", Am. J. Phys., 52, 623-625 (1984).
- F.M. Hornack, "Further Reflections on Heat", J. Chem. Educ., 61, 869-873 (1984).
- W.M. Moore, "The adiabatic expansion of gases and the determination of heat capacity ratios. A physical chemistry experiment2, J. Chem Educ., 61, 1119-1120 (1984).
- P.T. Landsberg, "Is equilibrium always an entropy maximun", J. Statist. Phys., 35, 159-169 (1984).
- N.O. Smith, The entropy criterion for chemical equilibrium. An exercise in the second law", J. Chem. Educ., 62, 50-54 (1985).
- R.A. Alberty, I. Oppenheim, "Fundamental equation for systems in chemical equilibrium", J. Chem. Phys., 89, 3689-3693 (1988).
- A. Kundu y N. Kishore, "Apparent molar heat capacities and apparent molar volumes of aqueous 1,1,1,3,3,3-hexafluoroisopropanol at different temperatures", J. Solution Chem., 33, 1085-1095 (2004).
- C.F. Anderson y M. Thomas Record, "Gibbs-Duhem-based relationships among derivatives expressing the concentration dependences of selected chemical potentials for a multicomponent system", Biophys. Chem., 112, 165-175 (2004).
- J.A. Coch Frugoni, M. Zepka, A. Rocha Figueira, M. Coretti, "A simple and economic three-dimensional model for the PVT surface of water", J. Chem. Educ., 61, 1048 (1984).
- M.J. Blandamer, J. Burgess, J.W.M. Scott, "Pistons, pressures, and the phase rule", J. Chem Educ., 61, 418-420 (1984).
- L.K. Nash, "Trouton and T-H-E rule", J. Chem. Educ., 61, 981-984 (1984).
- C.C. Mjojo, "A classroom experiment on phase equilibria involving orientational disordering in crystals", J. Chem Educ., 62, 83-84 (1985).
- V. Tchijov y otros, "Thermodynamics of high-pressure ice polymorphs: ices III and IV", J. Phys. Chem. Solids, 65, 1277-1283 (2004).
- I.M. Mills y otros, "Redefinition of the Kilogram: a decisión whose time has come", Metrologia, 42, 71-80 (2005).



- The Nobel Foundation, "Nobel laureates in Chemistry", http://library.thinkquest.org/2690/hist/nobel.html.
- W. Ayma Carrasco y otros, "Determinación de constantes físicas", http://www1.monografias.com/constantes-fisicas .shtmml.
- M. Alonso Soler y N. Piñeiro Suárez, "¿Cómo escribir un artículo científico?", http://www.monografias.com/articulo-cientifico.shtml.


**9. TÉCNICAS DE EVALUACIÓN** (enumerar, tomando como referencia el catálogo de la correspondiente Guía Común)

- Exámenes escritos.
- Autoevaluaciones.
- Resolución de ejercicios y problemas individuales en actividades académicamente dirigidas.
- Control de asistencia a clases teóricas y prácticas, seminarios, tutorías y actividades académicas dirigidas.
- Resolución de ejercicios y problemas propuestos a lo largo del desarrollo de las exposiciones y debates en las clases teóricas y prácticas y en los seminarios.

UNIVERSIDAD DE JAÉN

**Criterios de evaluación y calificación** *(referidos a las competencias trabajadas durante el curso)***:**

- Los exámenes escritos de teoría y problemas se valoraran con un 70% del total de la calificación de la asignatura sobre diez puntos.
- El resultado de las autoevaluación se valorará con un 10% del total de la calificación de la asignatura sobre diez puntos.
- El resultado de la resolución individual de los ejercicios y problemas de las actividades académicamente dirigidas se valorará con un 20% del total de la calificación de la asignatura sobre diez puntos.
- La asistencia a las clases teóricas y prácticas, seminarios, tutorías y actividades académicas dirigidas, se valorará con hasta un punto adicional sobre la calificación de hasta diez puntos correspondiente al conjunto formado por los exámenes, autoevaluación y actividades académicamente dirigidas, y siempre que el estudiante consiga una calificación mínima de 4 en aquella hecha sobre diez puntos, referida en los puntos anteriores.
- La resolución de ejercicios y problemas propuestos a lo largo del desarrollo de las exposiciones y debates en las clases teóricas y prácticas y en los seminarios se valorará con hasta un punto adicional sobre la calificación de hasta diez puntos correspondiente al conjunto formado por los exámenes, autoevaluación, actividades académicamente dirigidas, a razón de un máximo de una décima de punto por cada uno de tales ejercicios y problemas, y siempre que el estudiante consiga una calificación mínima de 4 en aquella hecha sobre diez puntos, referida en los tres primeros puntos.

UNIVERSIDAD DE JAÉN

*Distribuya semanalmente el número de horas que ha respondido en el punto 5*

| **10. ORGANIZACIÓN DOCENTE SEMANAL** (Sólo hay que indicar el número de horas que a ese tipo de sesión va a dedicar el estudiante cada semana) | | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| SEMANA | Nº de horas de sesiones Teóricas | Nº de horas sesiones prácticas | Nº de horas Exposiciones y seminarios | Nº de horas Tutorías Especializadas | Nº de horas Actividades Académicamente Dirigidas | Nº de horas Realización Otro Trabajo Personal Autónomo | Exámenes | Temas del temario a tratar |
| **2º Cuatrimestre** | | | | | | | | |
| **1ª:** 23-27 feb. | 2 | | | 1 | | 1 | | 1º-8º y 1º |
| **2ª:** 2–6 marzo | 1 | | 2 | | | 3 | | 1º-8º y 1º |
| **3ª:** 9-13 marzo | 2 | 1 | | | | 2 | | 1º y 2º |
| **4ª:** 16–20 marzo | 3 | | | | | 3 | | 2º |
| **5ª:** 23 – 27 marzo | 1 | 2 | | | | 3 | | 2º |
| **6ª:** 30 mar.-3 abr. | 3 | | | | | 3 | | 3º |
| ***6-13 abril*** | **SEMANA SANTA** | | | | | | | |
| **7ª:** 14–17 abril | 1 | 2 | | | | 3 | | 3º y 4º |
| **8ª:** 20–24 abril | 2 | 0 | | | | 4 | | 1º-3º y 5º |
| **9ª:** 27 abr.–1 mayo | 2 | | | 1 | | 3 | | 5º |
| **10ª:** 4-8 mayo | 2 | | 1 | | | 4 | | 5º y 5º-8º |
| **11ª:** 11-15 mayo | 0 | 3 | | | | 3 | | 5º |
| **12ª:** 18-22 mayo | 2 | | | | 1 | 3 | | 1º-5º, 6º y 7º |
| **13ª:** 25-29 mayo | 1 | 2 | | | | 3 | | 7º |
| **14ª:** 1-5 junio | 2 | | | 1 | | 3 | | 8º |
| **15ª:** 8–10 junio | | 2 | | | 0,5 | 3 | | 8º y 1º-8º |
| ***16ª: 12- 19 junio*** | | | | | | ***4*** | | ***1º-8º*** |
| ***17ª: 22-26 junio*** | | | | | | ***4*** | | ***1º-8º*** |
| ***18ª: 29 jun-3 julio*** | | | | | | ***4*** | | ***1º-8º*** |
| ***19ª: 6-9 julio*** | | | | | | ***4*** | | ***1º-8º*** |

UNIVERSIDAD DE JAÉN

## 11. TEMARIO DESARROLLADO *(con indicación de las competencias que se van a trabajar en cada tema)*

A) Química Física y Termodinámica Química: La Química Física como ciencia y Las leyes cero y primera de la Termodinámica en Química y Química Física.

1. Iniciación a la Química Física e Introducción a la Termodinámica Química. Ley cero de la Termodinámica.

- Introducción, objetivos y competencias a trabajar.

- Orígenes y Objetivos de la Química Física.

- Partes y Métodos de trabajo de la Química Física. La Termodinámica Química como una aplicación de la Termodinámica al estudio macroscópico de los sistemas químicos y fisicoquímicos.

- La Termodinámica: Algunos conceptos básicos para su estudio (sistemas, paredes, estados y variables de estado, equilibrios, procesos, etc).

- Equilibrio Térmico: Temperatura y ley cero de la Termodinámica.

- Algunos fundamentos fisicomatemáticos básicos en el estudio de la Termodinámica Química (Función de varias variables, derivadas parciales, diferencial total y exacta de una función, relaciones entre derivadas parciales, trazado de gráficas y cálculos a partir de ellas y mediante análisis numérico de rectas tangentes a las mismas e integración gráfico-numérica, integrales de línea e integrales cíclicas, etc)

(Competencias específicas cognitivas a trabajar: 1, 2 y 4)

2. Aspectos de interés químicos y químico físicos de la primera ley de la Termodinámica y de sus magnitudes de estado asociadas energía interna, U, (o total E) y entalpía, H, y sus aplicaciones al estudio de los gases.

- Introducción, objetivos y competencias a trabajar.

- El trabajo en Termodinámica. Sistemas P-V-T.

- Los conceptos de calor, energía interna y energía total de un sistema termodinámico. Equivalente mecánico del calor y relación entre $\Delta U$ (o $\Delta E$) y $Q_v$.

- Primera ley de la Termodinámica. Convenios de signos.

- Función entalpía. Relación entre $\Delta H$ y $Q_p$.

- Capacidades caloríficas y calores específicos. Relación $C_p$-$C_v$ y Relación de Mayer para los gases perfectos.

- Energía interna y entalpía en gases: El experimento de Joule, sobre la expansión libre y adiabática de un gas, y el de Joule-Thomson, sobre su estrangulación adiabática a través de un tabique poroso.

- Gases perfectos y primera ley de la Termodinámica.

(Competencias específicas cognitivas a trabajar: 2-6)

3. La Termoquímica de las reacciones como una aplicación de la primera ley.

- Introducción, objetivos y competencias a trabajar.

- Calor de reacción. Relaciones entre $Q_p$ y $Q_v$.

- Leyes termoquímicas. Ley de Lavoisier –laplace y ley de Hess.

- Calor normal de formación de un compuesto y energías y entalpías relativas: Su uso en la determinación de calores de reacción.

- Calores de combustión de una sustancia. Su uso en la determinación de calores de formación de compuestos.

- Energías de enlace en Termoquímica: Su uso en la determinación de calores normales de formación de compuestos.

- Dependencia de los calores de reacción con la temperatura. Ley de Kirchoff.

- Cálculo termoquímico de la temperatura de una llama y de la temperatura y presión de una explosión.

(Competencias específicas cognitivas a trabajar: 4,5,7)

B) Química Física y Termodinámica Química: Las leyes segunda y tercera de la Termodinámica en química y Química Física:

4. Aspectos de interés químico y químico físicos de la segunda ley de la Termodinámica y de su magnitud de estado asociada entropía, S, y sus aplicaciones al establecimiento del criterio entrópico de irreversibilidad, reversibilidad y equilibrio en los sistemas termodinámicos.

- Introducción, objetivos y competencias a trabajar.

- Máquinas térmicas y enunciados de Kelvin-Planck y de Clausius de la segunda ley de la Termodinámica.

- Principio de Carnot y rendimiento máximo de una máquina térmica. La función de estado entropía.

- Ejemplos de cálculo de variaciones de entropía en procesos de interés químico y fisicoquímico.

- Criterio entrópico de reversibilidad, irreversibilidad y equilibrio en los sistemas termodinámicos. Enunciado entrópico de la segunda ley.

- Interpretación probabilística de la función entropía. Principio de Boltzmann.

(Competencia específica cognitiva a trabajar: 8)

5. La segunda ley y los cambios materiales en los sistemas termodinámicos. Él método de Gibbs de los potenciales termodinámicos para el estudio de los sistemas y su uso para el establecimiento de los criterios de espontaneidad y equilibrio en los mismos.

- Introducción, objetivos y competencias a trabajar.

- La función entropía en relación a los procesos y equilibrios materiales.

- Energías libres de Gibbs, G, y Helmholtz, F. Los potenciales termodinámicos y su uso para el establecimiento de condiciones específicas de espontaneidad, reversibilidad y equilibrio y para la obtención del trabajo máximo total, en procesos isotermos, y neto (o útil) máximo en procesos isotermos e isóbaros.

- Relaciones termodinámicas en un sistema cerrado en equilibrio: Ecuaciones básicas, ecuaciones de Gibbs y Gibbs-Helmholtz, relaciones de Maxwell y dependencia de los potenciales termodinámicos y de la entropía con las variables P-V-T.

- Termodinámica de gases: Cálculo de los coeficientes de Joule y Joule-Thomson y de la relación $C_p - C_v$ para ellos.

- Termodinámica de los sistemas abiertos o cerrados multicomponentes con cambios materiales: Ecuaciones de Gibbs, espontaneidad, reversibilidad y equilibrio y el concepto de potencial químico de una sustancia.

- Condición general de equilibrio material y potenciales químicos: Equilibrio en procesos de cambios de fase y equilibrio químico en sistemas reactivos.

(Competencias específicas cognitivas a trabajar: 9-10)

6. La tercera ley de la termodinámica y su aplicación a la determinación de entropías relativas y de entropías y energías libres normales de reacción.

- Introducción, objetivos y competencias a trabajar.

- Entropía relativa de una sustancia, postulado de Nernst y tercera ley de la Termodinámica.

- La inaccesibilidad del cero absoluto de temperaturas y la tercera ley de la Termodinámica.

- Determinación de entropías relativas (o convencionales) de sustancias.

- Entropías y energías libres normales de reacción.

(Competencia específica cognitiva a trabajar: 11)

C) Termodinámica Química: Introducción al estudio de los sistemas multicomponentes, a la ley de las fases y a su aplicación para el estudio de los cambios de fase de primer orden.

7. Termodinámica de los sistemas multicomponentes. Magnitudes molares parciales.

- Introducción, objetivos y competencias a trabajar.
- Las funciones homogéneas de composición de una mezcla y el concepto de propiedad molar parcial de las magnitudes extensivas de los componentes de una disolución.
- Relaciones entre diferentes magnitudes molares parciales de un componente en una disolución.
- Magnitudes molares parciales térmicas: calores integral y diferencial de disolución.
- Métodos de determinación de magnitudes molares parciales: Directos, indirecto (o de las propiedades molares aparentes) y de las intersecciones.
- Ecuación de Gibbs-Duhem y su relevancia y aplicabilidad en la Termodinámica Química de disoluciones.

(Competencia específica cognitiva a trabajar: 12)

8. Ley de las fases de Gibbs. Termodinámica de los cambios de fases en sistemas unicomponentes.

- Introducción, objetivos y competencias a trabajar.
- Conceptos básicos en el estudio de la ley de las fases y los cambios de fases.
- Ley de las fases de Gibbs y su aplicación a sistemas de un solo componente. Diagramas de fase.
- El potencial químico en el establecimiento de la existencia de fases en sistemas unicomponentes. Diagramas μ-T a presión constante.
- Cambios de fase de primer orden en sistemas de un solo componente. Ecuaciones de Clapeyron y Clausius-Clapeyron.
- Dependencia de los calores de cambios de fase de primer orden con la temperatura.. Ecuación de Planck.
- Cálculo de la curva de presión de vapor. Reglas empíricas y semiempíricas de uso más común.
- Dependencia de la presión de vapor con la presión externa. Ecuación de Gibbs.

(Competencia específica cognitiva a trabajar: 13)

**12. MECANISMOS DE CONTROL Y SEGUIMIENTO** *(al margen de los contemplados a nivel general para toda la experiencia piloto, se recogerán aquí los mecanismos concretos que los docentes propongan para el seguimiento de cada asignatura)***:**

Se realizará una encuesta coincidiendo con una de las sesiones de actividades académicamente dirigidas con presencia del profesor de finales de curso, de manera que la mitad de la hora de dicha sesión se dedicará a pasar el cuestionario. En él se plantearan cuestiones que permitan recoger al profesor la opinión de los estudiantes sobre el desarrollo de la asignatura, incluyendo todas las actividades contempladas en el organigrama metodológico y propuestas de evaluación de los resultados, así como su grado de satisfacción con la experiencia piloto tanto a nivel de esta asignatura como de toda la experiencia en si.

También se llevará un control de asistencia a todas las actividades obligatorias y voluntarias, las cuales se tendrán en cuenta en la evaluación de la asignatura conforme a como se especificó en el apartado 9, referido a técnicas de evaluación.

Finalmente, se propone también la elaboración de una breve memoria dando cuenta del desarrollo de la experiencia piloto en relación con esta asignatura.