

Universidad Interamericana de Puerto Rico

Recinto _____

Departamento de _____

Programa de Química

PRONTUARIO

I. Información General

Título del Curso: Termodinámica

Código y Número: **CHEM 3910**

Créditos: 4 créditos

Requisitos:

Término Académico:

Profesor:

Horas de Oficina:

Teléfono Oficina:

Correo electrónico:

II. Descripción del Curso:

Estudio teórico y experimental de los principios físicos fundamentales que gobiernan las propiedades y comportamiento de los sistemas químicos, con énfasis en el enfoque macroscópico. Incluye termodinámica y sus aplicaciones a equilibrios de fase y equilibrios químicos, sistemas no ideales: gases reales y soluciones y electroquímica. Requiere 45 horas de conferencia y 45 horas de laboratorio cerrado presencial.

III. Objetivos del Curso:

A. Terminales

Al concluir satisfactoriamente el curso de CHEM 3910 el estudiante habrá adquirido los siguientes conocimientos y desarrollado las correspondientes destrezas:

A.1. Funciones termodinámicas (energía interna, entalpía, entropía, energía libre, etc.) y sus aplicaciones.

A.2. Potencial químico aplicado a equilibrio de fases y equilibrio químico.

A.3. Sistemas no ideales: gases reales y soluciones.

A.4. Procesos de transporte: conductividad térmica, viscosidad, difusión conductividad eléctrica.

B. Capacitantes:

Los siguientes objetivos capacitan al estudiante para lograr los objetivos terminales del curso.

B.1. Ley Cero y Primera Ley de Termodinámica

- B.1.1 Discutir el efecto de la termodinámica y su papel en la química-física.
- B.1.2 Discutir los siguientes conceptos y proponer ejemplos: sistema y entorno (alrededores); clases de sistemas; pared y sus tipos; sistema en equilibrio y sus tipos; propiedades termodinámicas y sus tipos; estados de la materia y funciones de estado; ecuaciones de estado.
- B.1.3 Enunciar la Ley Cero de Termodinámica y explicar su significado. Definir el concepto de temperatura.
- B.1.4 Establecer el concepto de trabajo tipo PV y su expresión matemática.
- B.1.5 Distinguir entre procesos reversibles e irreversibles.
- B.1.6 Establecer el concepto de calor y escribir la expresión matemática para la transferencia de calor entre dos cuerpos a diferentes temperaturas. Definir los conceptos de capacidad calorífica y calor específico con sus respectivas unidades.
- B.1.7 Escribir la expresión matemática para la Primera Ley de Termodinámica en términos finitos y en términos diferenciales. Discutir su significado e identificar la función de estado definida por la Primera Ley.
- B.1.8 Distinguir entre funciones de estado y funciones de paso.
- B.1.9 Definir el concepto de entalpía.
- B.1.10 Aplicar la Primera Ley para demostrar que $\Delta U = q_V$ y que $\Delta H = q_P$
- B.1.11 Definir los conceptos de C_V y C_P y relacionarlos con dU y dH .
- B.1.12 Describir el experimento de Joule y definir el coeficiente μ_J
- B.1.13 Describir el experimento de Joule-Thomson y definir el coeficiente μ_{JT} .

- B.1.14. Aplicar la Primera Ley a procesos de gases perfectos.
- B.1.15. Discutir los procesos reversibles, isotérmicos y adiabáticos para gases perfectos.

B.2. Segunda Ley de Termodinámica

- B.2.1. Enunciar la Segunda Ley de Termodinámica y explicar su significado.
- B.2.2. Describir una máquina térmica y definir el concepto de eficiencia.
- B.2.3. Discutir el principio de Carnot relativo a las máquinas térmicas.
- B.2.4. Describir el ciclo de Carnot y demostrar que $dq/dT = 0$ para dicho ciclo. Expresar la eficiencia de una máquina reversible en términos de las temperaturas de las reservas calóricas, caliente y fría.
- B.2.5. Generalizar que $dq/dT = 0$ para cualquier proceso cíclico reversible y definir el concepto de entropía.
- B.2.6. Calcular ΔS para procesos reversibles, isotérmicos y adiabáticos, así como para procesos cíclicos.
- B.2.7. Calcular ΔS para cambios de fase reversibles, a P y T constante.
- B.2.8. Calcular ΔS para un cambio de estado reversible de un gas perfecto.
- B.2.9. Calcular ΔS para un calentamiento a P constante.
- B.2.10. Calcular ΔS para la mezcla de gases perfectos inertes a P y T constantes.
- B.2.11. Determinar ΔS_{univ} para procesos reversibles e irreversibles.
- B.2.12. Discutir la interpretación microscópica de la entropía.

B.3 Equilibrio Material

- B.3.1. Establecer la condición de equilibrio material para sistemas aislados y cerrados en términos de la entropía.
- B.3.2. Definir la energía libre de Gibbs (G) y la energía de Helmholtz (A) y establecer su significado termodinámico.

- B.3.3. Establecer la condición de equilibrio material en términos de las cantidades G y A.
- B.3.4. Identificar las seis ecuaciones básicas de la termodinámica.
- B.3.5. Derivar la expresión de dU, dH, dA y dG para sistemas de composición constante (Ecuaciones de Gibbs).
- B.3.6. Aplicar la relación de reciprocidad de Euler a las ecuaciones de Gibbs para obtener las relaciones de Maxwell.
- B.3.7. Definir el concepto de potencial químico (μ_i) del componente "i" en un sistema de una fase e identificar la ecuación fundamental de la termodinámica química.
- B.3.8. Establecer las ecuaciones de Gibbs para sistemas de composición variable.
- B.3.9. Entender la ecuación fundamental de la termodinámica química en un sistema de varias fases e identificar la condición de equilibrio material.
- B.3.10. Aplicar la condición general de equilibrio material al equilibrio de fases y al equilibrio químico.

B.4 Funciones Termodinámicas Estándar para Reacciones Químicas

- B.4.1. Definir el estado estándar termodinámico para sustancias puras.
- B.4.2. Definir el concepto de entalpía estándar de reacción, $\Delta H^{\circ}_{\text{rxn},T}$ y explicar su significado.
- B.4.3. Expresar $\Delta H^{\circ}_{\text{rxn},T}$ en términos de $\Delta H^{\circ}_{f,T}$ de reactivos y productos.
- B.4.4. Describir el calorímetro de bomba y discutir las relaciones energéticas que surgen en este tipo de calorímetro.
- B.4.5. Establecer la relación entre ΔH° y ΔU° para una reacción entre gases.
- B.4.6. Enunciar la ley de Hess y aplicarla a cálculo de $\Delta H^{\circ}_{\text{rxn}}$.
- B.4.7. Identificar la expresión que establece la dependencia de $\Delta H^{\circ}_{\text{rxn}}$ con la temperatura (Ley de Kirchoff)

- B.4.8. Enunciar la Tercera Ley de Termodinámica, explicar su significado y aplicarla al cálculo de entropías absolutas convencionales.
- B.4.9. Definir el concepto de entropía estándar de reacción, $\Delta S^{\circ}_{\text{rxn},T}$, y calcularla a partir de las entropías convencionales.
- B.4.10. Definir el concepto de energía de Gibbs de reacción, $\Delta G^{\circ}_{\text{rxn},T}$, y calcularla a partir de las energías de Gibbs estándar de formación, $\Delta G^{\circ}_{f,T}$.

B.5. Equilibrio Químico en Mezcla de Gases

- B.5.1. Identificar la expresión para el potencial químico (μ) de un gas ideal puro a cierta temperatura (T) y presión (P).
- B.5.2. Identificar la expresión para el potencial químico (μ_i) de un gas "i" en una mezcla ideal de gases a cierta temperatura (T) y presión parcial (P_i).
- B.5.3. Aplicar la condición general de equilibrio químico a una mezcla ideal de gases en reacción para establecer la expresión de K°_P , la constante de equilibrio estándar.
- B.5.4. Establecer las expresiones de K_c , K_x y su relación con K_P .
- B.5.5. Establecer la dependencia de K_P con la temperatura y discutir el método gráfico para determinar $\Delta H^{\circ}_{\text{rxn}}$ a partir de los valores de K_P distintas temperaturas.
- B.5.6. Predecir razonablemente el desplazamiento del equilibrio en mezcla ideal de gases en una reacción al cambiar las variables termodinámicas.

B.6. Equilibrio de Fases para Sistema de un Componente

- B.6.1. Discutir la regla de fases de Gibbs y su significado.
- B.6.2. Aplicar la regla de las fases a sistemas de un componente y describir el diagrama de fases para tales sistemas. Definir los conceptos de entalpía y entropía para cambios de fase.
- B.6.3. Establecer la ecuación de Clapeyron y explicar su significado.
- B.6.4. Integrar la ecuación de Clapeyron para los equilibrios líquido-vapor, sólido-vapor y sólido-líquido.

B.6.5. Discutir el método gráfico para determinar entalpías de vaporización y sublimación a partir de presiones de vapor a distintas temperaturas.

B.7. Gases Reales

B.7.1. Definir el concepto de factor de compresibilidad (Z) de un gas real y establecer las desviaciones del comportamiento ideal en términos de Z .

B.7.2. Identificar la ecuación de van der Waals y explicar el significado de sus términos.

B.7.3. Evaluar Z para un gas de van der Waals y discutir las curvas experimentales de Z vs P .

B.7.4. Identificar las ecuaciones de Redlich-Kwaig y virial.

B.8. Soluciones

B.8.1. Definir los conceptos de magnitudes molares parciales (V_m , U_m , H_m , S_m , G_m , etc.) de un componente en una solución y explicar su significado.

B.8.2. Expresar V , U , H , S , G , etc. para una solución en términos de las correspondientes magnitudes molares parciales de los componentes de la solución.

B.8.3. Identificar las expresiones que definen las magnitudes termodinámicas de mezcla y explicar su significado.

B.8.4. Discutir los métodos experimentales para determinar los volúmenes molares parciales de los componentes de una solución binaria.

B.8.5. Definir los conceptos de calor integral de solución y calor integral de disolución y explicar su significado. Discutir el método experimental para determinarlos.

B.8.6. Establecer la definición termodinámica de solución ideal en términos de potencial químico de cada componente de esta. Identificar el estado estándar para cada componente.

B.8.7. Determinar ΔG_{mix} , ΔV_{mix} , ΔS_{mix} , ΔH_{mix} y ΔU_{mix} para una solución ideal.

- B.8.8. Derivar la ley de Raoult a partir de la definición termodinámica de solución ideal y explicar su significado.
 - B.8.9. Identificar la expresión matemática para la presión de vapor de una solución ideal binaria en términos de la composición. Representar presión versus composición para dicho sistema.
 - B.8.10. Establecer la definición termodinámica de solución idealmente diluida en términos del potencial químico de cada componente (disolvente y solutos) de la misma. Identificar los estados estándar para el disolvente y para solutos.
 - B.8.11. Definir la ley de Henry, explicar su significado y aplicarla a la solubilidad de gases líquidos.
 - B.8.12. Comparar las gráficas de P vs x para soluciones ideales e idealmente diluidas.
- B.9. Soluciones no-ideales
- B.9.1. Establecer la definición termodinámica de solución no-ideal en términos del potencial químico de cada componente de esta.
 - B.9.2. Definir los conceptos de actividad y coeficiente de actividad. Explicar su significado.
 - B.9.3. Establecer los Convenios I y II para soluciones no-ideales en cuanto a estados estándar y coeficientes de actividad de los componentes.
 - B.9.4. Definir los conceptos de fugacidad y coeficiente de fugacidad de un gas en una mezcla no-ideal de gases y explicar su significado.
 - B.9.5. Identificar la expresión del potencial químico de un gas en una mezcla no-ideal de gases.
- B.10. Equilibrio Químico para Sistemas No-Ideales
- B.10.1. Derivar la expresión de constante de equilibrio en términos de las actividades, K^o , constante de equilibrio estándar.
 - B.10.2. Aplicar la constante de equilibrio estándar a reacciones en soluciones de no-electrolitos y establecer las expresiones de K_x , K_c y K_m .

B.11. Equilibrio de Fases para Sistemas de Varios Componentes

- B.11.1 Definir el concepto de propiedades coligativas.
- B.11.2 Identificar la expresión para el descenso en la presión de vapor de una solución y explicar su significado.
- B.11.3 Establecer las expresiones para el descenso en el punto de congelación y el ascenso en el punto de ebullición. Explicar el significado de K_f y K_b .
- B.11.4 Definir el concepto de presión osmótica y derivar su expresión matemática a partir de la condición de equilibrio de fases.
- B.11.5 Representar y discutir los diagramas de P vs x y T vs x para el equilibrio líquido-vapor de un sistema de dos componentes que forman una solución ideal.
- B.11.6 Representar y discutir los diagramas de P vs x y T vs x para el equilibrio líquido-vapor de un sistema de dos componentes que forman una solución no-ideal. Definir el concepto de azeótropo.
- B.11.7 Representar y discutir el diagrama de T vs x , a P , para el equilibrio sólido-líquido de un sistema de dos componentes miscibles en fase líquida e inmiscibles fases sólidas. Definir el concepto de punto eutéctico.

B.12. Electroquímica

- B.12.1 Enunciar la Ley de Coulomb y su importancia
- B.12.2 Definir el concepto de potencial eléctrico, ϕ , entre dos puntos.
- B.12.3 Establecer la expresión del potencial electroquímico y la condición de equilibrio de fase en términos de éste.
- B.12.4 Describir las características y partes principales de una celda galvánica y una celda electrolítica.
- B.12.5 Establecer el diagrama de una celda galvánica dada la reacción química envuelta y viceversa.
- B.12.6 Establecer las medias reacciones en cada electrodo dado el esquema de una celda.

- B.12.7. Aplicar la ecuación de Nernst para calcular el potencial de una celda.
- B.12.8. Establecer la relación entre $\Delta G^{\circ}_{\text{rxn}}$, el potencial de una celda y la constante de equilibrio de una reacción redox.

IV. Contenido del Curso

- IV.1. Termodinámica
- IV.1.1 Ley Cero y Temperatura
 - IV.1.2. Primera Ley de Termodinámica
 - IV.1.3. Segunda Ley de Termodinámica
- IV.2. Equilibrio Material
- IV.2.1. Energía Libre de Gibbs y Helmholtz
 - IV.2.2. Potencial Químico
 - IV.2.3. Equilibrio de Fases y Equilibrio Químico
- IV.3. Funciones Termodinámicas Estándar
- IV.3.1. Entalpías estándar de reacción
 - IV.3.2. Entropía estándar de reacción. Tercera Ley de Termodinámica.
 - IV.3.3. Energía Libre de Gibbs estándar de reacción
- IV.4. Equilibrio químico de una mezcla de gases
- IV.4.1. Potenciales químicos en mezcla ideal de gases
 - IV.4.2. Equilibrio de reacción en mezcla ideal de gases
 - IV.4.3. Dependencia de la constante de equilibrio con T
 - IV.4.4. Desplazamiento del equilibrio
- IV.5. Equilibrio de fases para un componente
- IV.5.1. Regla de las fases de Gibbs
 - IV.5.2. Diagrama de fases
 - IV.5.3. Ecuación de Clapeyron
- IV.6. Gases reales
- IV.6.1. Factor de compresión
 - IV.6.2. Ecuaciones de estado de gases reales
 - IV.6.3. Isotermas de gases reales
 - IV.6.4. Estado crítico
- IV.7. Soluciones

- IV.7.1. Cantidades molares parciales
- IV.7.2. Cantidades de mezcla
- IV.7.3. Determinación de cantidades molares parciales
- IV.7.4. Soluciones ideales. Ley de Raoult
- IV.7.5. Soluciones idealmente diluidas. Ley de Henry

- IV.8. Soluciones no-ideales
 - IV.8.1. Actividad y coeficientes de actividad
 - IV.8.2. Determinación de coeficientes de actividad
 - IV.8.3. Soluciones de electrolitos
 - IV.8.4. Teoría de Debye-Huckle

- IV.9. Equilibrio químico para sistemas no-ideales
 - IV.9.1. Constante de equilibrio
 - IV.9.2. Equilibrio químico en soluciones de electrolitos y no-electrolitos
 - IV.9.3. Equilibrio químico de fase heterogénea
 - IV.9.4. Dependencia de la constante de equilibrio con T y P

- IV.10. Equilibrio de fase para sistemas de varios componentes
 - IV.10.1. Propiedades coligativas
 - IV.10.2. Descenso en la presión de vapor
 - IV.10.3. Descenso en el punto de congelación y ascenso en el punto de ebullición
 - IV.10.4. Presión osmótica
 - IV.10.5. Diagramas de fase para sistemas de dos componentes

- IV.11. Electroquímica
 - IV.11.1. Termodinámica de sistemas electroquímicos
 - IV.11.2. Celdas galvánicas
 - IV.11.3. Ecuación de Nernst

V. Estrategias de enseñanza:

1. Conferencia
2. Trabajos en equipo
3. Presentaciones orales
4. Experiencias de laboratorio
5. Uso de programas como EXCEL y otros

VI. Evaluación del Curso:

1. La evaluación del curso consta de dos partes:

Conferencia (70%) y Laboratorio (30%). La siguiente tabla contiene el peso de cada componente en la conferencia:

Criterios de Evaluación	Puntuación	Peso en la nota final (%)
Examen Parcial 1	100	17.5
Examen Parcial 2	100	17.5
Examen Parcial 3	100	17.5
Examen Final	120	17.5
Total de Puntos	420	70%

2. La parte de la Conferencia consiste en tres exámenes parciales y un examen final de todo el material discutido en clase. Todos los exámenes tienen el mismo peso.
3. La parte del Laboratorio envuelve de 7 a 8 informes de laboratorio, una nota de apreciación y un examen final. Al momento de revisar este prontuario (agosto 2020), los laboratorios serán ofrecidos de forma virtual. Esto puede estar sujeto a cambios según las directrices del Presidente de la Institución.

- **Evaluación del Laboratorio:**

	Puntuación	Peso en Nota Final
7 informes de laboratorio	700	15%
Nota de Apreciación	100	3%
Nota Examen Final	100	12 %
Total Puntos	900	30%

- **Experimentos de Laboratorio Planificados:**

1. Viscosidad de un líquido orgánico en función de la temperatura
2. Entalpía de combustión de un compuesto orgánico (calorimetría)
3. Volúmenes molares parciales de soluciones acuosas de NaCl
4. Conductancia de electrolitos fuertes y débiles
5. Estudio termodinámico del equilibrio lactona/zwitterion en rodamina B
6. Diagrama de fases de un sistema binario (naftaleno-p diclorobenceno)
7. Determinación del pK_a en el primer estado singlete excitado de 2-naftol
8. Tensión de Vapor de un líquido

El manual de laboratorio ha sido preparado por el Dr. Colom y está disponible en “Blackboard”.

NO HAY REPOSICIONES DE LABORATORIOS. SI SE AUSENTA A UN LABORATORIO NO PUEDE ENTREGAR EL INFORME DE ESE EXPERIMENTO.

POR REGLAS DEL DEPARTAMENTO DE CIENCIAS NATURALES, SI SE AUSENTA A TRES LABORATORIOS O MÁS RECIBIRÁ “F” EN EL CURSO.

VII. CURVA usada en CHEM 3910

La nota final de curso se calcula sumando los porcentos obtenidos en la conferencia (de 70%) y el obtenido en el laboratorio (de 30 %).

100-85 A 84 - 75 B 74 - 65 C 64 – 55 D 54 - 0 F

VIII. Notas Especiales:

Todo estudiante que requiera servicios auxiliares o asistencia especial deberá solicitar los mismos al inicio del curso o tan pronto como adquiera conocimiento de los servicios que necesitará, a través del registro en la Oficina del Consejero Profesional, el Sr. José Rodríguez del Programa de Orientación Universitaria.

Plagio y Fraude:

Es importante que tenga claro que las diferentes formas de plagio (el uso de ideas o palabras de otra persona sin el debido reconocimiento) es una infracción académica con consecuencias muy serias. Ver el *Reglamento General de Estudiantes de la Universidad Interamericana 2004*, desde la página 60 en adelante para ejemplos de los tipos de plagio y las sanciones que aplican. En este curso se penalizará este tipo de práctica.

Uso de dispositivos electrónicos:

Se desactivarán los teléfonos celulares y cualquier otro dispositivo electrónico que pudiese interrumpir los procesos de enseñanza y aprendizaje. Las situaciones o llamadas personales serán atendidas fuera del salón de clases. Si utiliza su celular para “chatear, ver películas, oír música, etc.” durante la clase, le pediré que salga del salón o del laboratorio. Se prohíbe el manejo de dispositivos electrónicos que permitan acceder, almacenar o enviar datos durante evaluaciones o exámenes.

IX. Texto del Curso:

Levine, I.N. "Physical Chemistry", Edición más reciente, McGraw-Hill, Inc.: New York. (Realmente puede usar cualquiera de las ediciones).

X: Referencias:

1. Shoemaker et al., "Experiments in Physical Chemistry", 7th Edition, McGraw-Hill: New York, 2003.
2. Raff, L.M., "Principles of Physical Chemistry", Prentice Hall: Upper Saddle River, New Jersey, 2001.
3. Ball, D. "Physical Chemistry", Brooks/Cole-Thomas Learning: Pacific Gove, CA, 2003.
4. Laidler, K.J. et al., "Physical Chemistry", 4th Edition, Houghton Mifflin Company: Boston, MA, 2003.
5. Atkins, P., de Paula, J., and Keeler J. "Atkin's Physical Chemistry", 11th Edition, Oxford University Press: Oxford, United Kingdom, 2018.
6. Monk, Paul and Munro, Lindsey J. "Maths for Chemistry: A chemist's toolkit of calculations", 2nd Edition, Oxford University Press: Oxford, U.K, 2010.

Revisado septiembre 2021