

QI-42Z FISICOQUIMICA APLICADA

UNIDADES DOCENTES	:	9 U.D. (4-2-3)
REQUISITOS	:	QI-223
CARACTER	:	Obligatorio Ingeniería Civil Química
OBJETIVOS	:	El curso es complementario para alumnos que han iniciado estudios en Fisicoquímica. El énfasis se pone en Cinética Química, fenómenos de superficie y Termodinámica Estadística, que terminan configurando el cuadro de fenómenos que son estudiados mediante las herramientas que entrega la Termodinámica y las teorías modernas en Química.

CONTENIDO

1. Cinética Química: Introducción. Leyes Empíricas. Reacciones de primer, segundo y tercer orden. Reacciones de orden superior. Reacciones Complejas (paralelas, opuestas y consecutivas). Determinación experimental del orden de reacción. Mecanismo de reacción. Mecanismo de Lindemann y mecanismo de radicales libres. Velocidad de reacción y temperatura. Ecuación de Arrhenius. Energía de activación. Aspectos teóricos de cinética. Teoría de colisiones y teoría de velocidad absolutas de reacción.
(20 Hrs.)
2. Catálisis: Reacciones heterogéneas. Etapas de mecanismo de las reacciones de superficie. Descomposiciones simples en superficies. El rol de la superficie en catálisis.
(6 Hrs.)
3. Fisicoquímica de interfases: Fase interfacial. Ecuación de Gibbs-Duhem bidimensional. Adsorción y exceso superficial. Ecuación de Gibbs. La superficie de los líquidos. Tensión superficial y su determinación experimental. La superficie de una solución líquida. Interfase líquido-líquido. Films moleculares. Interfase sólido-líquido. Calor de inmersión. La ecuación de Young. Interfase sólido-solución líquida. La interfase gas-sólido. Tiempo de adsorción. Isoterma de Langmuir. Métodos para determinar el área de los sólidos. Modelo BET. La ecuación de Gibbs y la interfase gas-sólido. Algunos modelos de adsorción en superficie homogéneas.
(20 Hrs.)

4. Termodinámica Estadística: Probabilidades termodinámica de un sistema. Entropía y distribución más probable. La función de partición Q. Funciones Termodinámicas de un Sistema. Separabilidad de Q. Aplicación en sistema simples (gases ideales monoatómicos). Cálculo estadístico de la constante de equilibrio.

(14 Hrs.)

ACTIVIDADES

Clases Teóricas: 30 sesiones de 1 1/2 hora cada una.

Controles: Se realizarán 3 controles. Cada control versará sobre la materia pasada hasta la semana anterior a la del control. El examen se tomará en la fecha que fija la Escuela y comprenderá toda la materia vista en el semestre incluyendo el examen recuperativo, la nota de control (C) se obtendrá promediando las cuatro mejores notas.

Ejercicios: Estos consistirán en resolver un problema consultando libros y apuntes. No habrá recuperación de ejercicios, pero para obtener la nota de ejercicios (E) se considerará solo el 80% de los ejercicios realizados.

Calificación Final: La calificación final se obtendrá de la siguiente relación:

$$\text{NOTA FINAL: } C \times 0.7 + E \times 0.3$$

BIBLIOGRAFIA

- G.W. Castellan. Fisicoquímica. Mc Graw Hill (1967).
- S. Maron y C.F. Prutton. Fundamentos de Fisicoquímica. Limusa. (1977).
- S. Glasstone. Termodinámica para Químicos. Aguilar. (1977).
- S. Ross and J.P. Oliver, On Physical Adsorption Interscience Publishers. (1964).
- S. Brunaver. The adsorption of Gases and Vapors. Oxford University Press. (1945).
- S. Droguett. Elementos de Catálisis Heterogeneas. Monografía OEA número 26. (1983).
- O.Levenspiel. Ingeniería de las Reacciones Químicas. Reverté. (1974).
- K.J.Laidler. Chemical Kinetics. Mc. Graw Hill. (1950).
- B.C. Gaete, J.R. Katzer and G., C.A. Schuit. Chemistry of Catalytic Processes. Mc. Graw Hill. (1979).
- J.H. de Boer. The Dynamical Character of Adsorption. Oxford University Press. (1968).
- Curso Centros Metálicos y Centros Ácidos en Catálisis Heterogéneas. Publicado por Depto. Química. U. de Concepción. (1985).
- J.H. Thomas and N. J. Thomas. Introduction to the Principles of Heterogeneous Catalysis. Academic Press. (1970).