



Guía Docente:

TERMODINÁMICA Y CINÉTICA QUÍMICA



FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS
UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID
CURSO 2011-2012



I.- IDENTIFICACIÓN

NOMBRE DE LA ASIGNATURA: Termodinámica y Cinética Química
CARÁCTER: Obligatoria
MATERIA: Termodinámica e Ingeniería Térmica
MÓDULO: Ingeniería Industrial
TITULACIÓN: Grado en Ingeniería Química
SEMESTRE/CUATRIMESTRE: Primero (segundo curso)
DEPARTAMENTO/S: Química Física I

PROFESOR/ES RESPONSABLE/S:

Grupo A		
Teoría	Profesor: Departamento: Despacho: e-mail:	MIGUEL ÁNGEL RASO GARCÍA Química Física I QA-503 marg@quim.ucm.es
Seminario Tutoría	Profesor: Departamento: Despacho: e-mail:	MIGUEL ÁNGEL RASO GARCÍA Química Física I QA-503 marg@quim.ucm.es
Seminario Tutoría	Profesor: Departamento: Despacho: e-mail:	MAURICIO ALCOLEA PALAFOX Química Física I QA-247 alcolea@quim.ucm.es
Prácticas	Coordinadora: Departamento: Despacho: e-mail:	AURORA COMPOSTIZO SAÑUDO Química Física I QB-205 aurora.compostizo@quim.ucm.es

II.- OBJETIVOS

■ OBJETIVO GENERAL

Se trata de una asignatura en la que se desarrollarán algunos aspectos de la Química Física, y cuyo objetivo es que el alumno entre en contacto con los conceptos básicos involucrados en esta disciplina, aportándole las herramientas químico-físicas adecuadas para afrontar el resto de los contenidos del Módulo Ingeniería Industrial. En esta asignatura se introducirán los conceptos teóricos básicos de termodinámica y cinética química necesarios para poder comprender las reacciones y equilibrios químicos, así como la termodinámica involucrada en las transiciones de fase y disoluciones. Se introducirán los conceptos más fundamentales de electroquímica, de superficies e interfases y de fenómenos de adsorción sobre sólidos.



■ OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Conocer los fundamentos de la Termodinámica Química y entender las condiciones de equilibrio y espontaneidad de un sistema químico.
- Entender la aplicación de la termodinámica a gases, mezclas de gases, sustancias puras en fase condensada y disoluciones, así como al equilibrio químico y las transiciones de fase.
- Comprender el concepto de actividad química y sus aplicaciones.
- Conocer los fundamentos de la Cinética Química y su aplicación tanto a reacciones simples como complejas, y comprender la variación de la velocidad de una reacción química con la temperatura en términos de las teorías microscópicas más elementales.
- Conocer los fenómenos de conductividad en disoluciones de electrolitos y los fundamentos y aplicaciones de la electródica.
- Entender los fundamentos de la termodinámica de superficies y, en particular, el concepto de trabajo superficial. Comprender los fenómenos de nucleación, adhesión, mojado y adsorción.
- Comprender los procesos de adsorción de gases sobre sólidos y relacionar estos con las isothermas de adsorción.
- Desarrollar la capacidad para realizar cálculos cuantitativos en todas las áreas cubiertas por la asignatura.

III.- CONOCIMIENTOS PREVIOS Y RECOMENDACIONES

■ CONOCIMIENTOS PREVIOS:

■ RECOMENDACIONES:

Se recomienda haber superado las asignaturas *Química Básica*, *Física* y *Matemáticas I*.

IV.- CONTENIDOS

■ BREVE DESCRIPCIÓN DE LOS CONTENIDOS:

Primer y segundo principios de la termodinámica. La masa como variable termodinámica: el potencial químico. Tercer principio de la termodinámica. Cambio de fase. Disoluciones ideales y reales. Cinética y mecanismos de las reacciones químicas. Termodinámica de superficies. Electroquímica.

■ PROGRAMA:

TEORÍA Y SEMINARIOS

TEMA 1. Fundamentos de la Termodinámica

Capítulo 1

Definiciones fundamentales.- Principio cero.- Propiedades de las funciones de estado.- Ecuación de estado y coeficientes termoelásticos.- Concepto y medida de la



temperatura.- Escala de temperaturas absolutas.- Escala Práctica Internacional de Temperatura.

Capítulo 2

Sistemas simples.- Gas ideal y gas real.- Ecuación de Van der Waals.- El estado crítico.- Diagramas PV y PT.- Otras ecuaciones de estado.- Magnitudes reducidas.

Capítulo 3

Calor y trabajo.- Trabajo en sistemas hidrostáticos.- Trabajo en otros sistemas.- Transformaciones reversibles e irreversibles.- Función energía interna.- Primer principio de la termodinámica.- Entalpía.- Capacidades caloríficas.- Experimento de Joule.- Cambios adiabáticos para un gas ideal. Sistemas abiertos.

Capítulo 4

Procesos espontáneos.- Transformación de trabajo en calor.- El ciclo de Carnot.- Segundo principio de la termodinámica.- Rendimiento de las máquinas térmicas.- Escala Kelvin o termodinámica de temperaturas.- Entropía.- Consecuencias del segundo principio.

Capítulo 5

Cálculo de entropías - Tercer principio de la termodinámica.- Consecuencias del tercer principio.- Cálculo de entropías absolutas.

Capítulo 6

Condiciones para el equilibrio y espontaneidad.- Energía Helmholtz y energía Gibbs.- Relaciones de Maxwell.- Efecto de la temperatura y el volumen o la presión en la entropía.- Ecuaciones termodinámicas de estado.- Ecuaciones de Gibbs-Helmholtz. Propiedades residuales.

Capítulo 7

Sistemas multifásicos de un componente.- Condición de equilibrio entre fases.- Transiciones de fase de primer orden.- Diagramas de fases de sustancias puras.- Ecuaciones de Clapeyron y Clausius-Clapeyron.

TEMA 2. Termodinámica Química

Capítulo 8

Magnitudes molares parciales.- Criterios de equilibrio en sistemas multicomponentes.- La Regla de las Fases.- Potencial químico.- Fugacidad y actividad.- Estados estándar.

Capítulo 9

Mezclas de gases ideales.- Potencial químico de un gas en una mezcla.- Funciones de mezcla.- Fugacidad en una mezcla de gases reales.

Capítulo 10

Disoluciones ideales. Ley de Raoult.- Magnitudes termodinámicas del proceso de mezcla.- Equilibrio líquido-vapor en disoluciones ideales.- Puntos de burbuja y de rocío.- Disolución diluida ideal.- Ley de Henry.- Propiedades coligativas.



Capítulo 11

Disoluciones reales.- Actividad y coeficientes de actividad.- Variación de la actividad con la temperatura y la presión.- Determinación de actividades en disoluciones reales.- Cálculo de la actividad de un componente a partir de la de otro.- Funciones de mezcla y funciones de exceso.

Capítulo 12

Equilibrio líquido-vapor en sistemas reales.- Azeótropos.- Equilibrio líquido-líquido.- Equilibrio sólido-líquido.

Capítulo 13

Disoluciones de electrolitos.- Actividades y coeficientes de actividad.- Fuerza iónica.- Teoría de Debye-Hückel.- Determinación de coeficientes de actividad iónicos medios.

Capítulo 14

Reacción química.- Coordenada de reacción.- Equilibrio químico.- Ecuación de Van't Hoff.- Principio de Le Chatelier.- Determinación de constantes de equilibrio.- Regla de las fases en sistemas con equilibrios múltiples.

TEMA 3. Cinética Química

Capítulo 15

Velocidad de reacción.- Ecuación de velocidad.- Determinación del orden de reacción.- Ecuaciones integradas de velocidad.- Efecto de la temperatura.- Ecuación de Arrhenius.

Capítulo 16

Reacciones complejas: reversibles, consecutivas y competitivas.- Estado estacionario.- Métodos experimentales para la medida de la velocidad de reacción.

Capítulo 17

Teoría de colisiones.- Superficies de energía potencial.- Teoría del complejo activado.- Reacciones en cadena. Descomposiciones térmicas.- Reacciones en cadena ramificada. Reacciones en disolución.- Reacciones entre iones.

TEMA 4. Electroquímica, Superficies e Interfases

Capítulo 18

Conductividad eléctrica y su medida.- Movilidades iónicas.- Índices de transporte y su medida.- Ley de Kohlrausch.- Aplicaciones de las medidas de conductividad.

Capítulo 19

Células galvánicas y electrolíticas.- Electrodo: definiciones y tipos.- Representación de una célula.- Medida de la fuerza electromotriz.- Termodinámica de células galvánicas.- Ecuación de Nernst.- Tipos de electrodos.- Tipos de células.- Potencial de difusión.- Aplicaciones de las medidas de fem.- Baterías y pilas de combustible.

Capítulo 20

Tensión superficial.- Ecuación de Young-Laplace.- Ecuación de Kelvin.- Capilaridad.- Nucleación.- Interfase sólido-líquido.- Angulo de contacto y adhesión.- Ecuación de



Gibbs.- Isoterma de adsorción de Gibbs.- Tensioagentes.- Películas superficiales.- Coloides.

Capítulo 21

Interacciones gas-superficie.- Fuerzas superficiales, enlaces y estructura superficial.- Adsorción física.- Dispersión de haces atómicos y moleculares sobre superficies.- Isotermas de fisisorción.- Isoterma de Brunauer-Emmett-Teller.- Determinación de áreas superficiales.- Comparación entre quimisorción y fisisorción.- Isoterma de Langmuir.- Estructuras superficiales quimisorbidas.- Mecanismo de la quimisorción.- Catálisis heterogénea.

TUTORÍAS DIRIGIDAS

Tutoría 1

Diagrama de fases de sustancias puras. Polimorfismo. Metaestabilidad. Superfluidez.

Tutoría 2

Diagramas de fase líquido-vapor, líquido-líquido y sólido-líquido. Azeótropos. Temperaturas críticas. Eutécticos y peritéticos. Miscibilidad y solubilidad.

PRÁCTICAS DE LABORATORIO

Práctica 1

Tensión Superficial: determinación de la concentración micelar crítica de un tensoactivo (1 día)

Práctica 2

Calorimetría: determinación del calor específico de un cuerpo sólido (1 día)

Práctica 3

Células galvánicas: análisis termodinámico de un equilibrio electroquímico (1 día)

Práctica 4

Cinética Química: estudio de la velocidad de reacción de la hidrólisis de complejos de Fe (II) (1 día)

V.- COMPETENCIAS

■ GENERALES:

La competencia general del título CG1 se desarrolla en el módulo Ingeniería Industrial en ocho, CG1-MII1 a CG1-MII8; entre éstas, son de aplicación en la asignatura, con las particularidades que se indican, las siguientes:

- **CG1-MII1:** Aplicar conceptos de termodinámica aplicada.
- **CG1-MII7:** Utilizar los principios termodinámicos de máquinas térmicas.



■ ESPECÍFICAS:

La competencia específica del título CE7 se desarrolla para la materia Termodinámica e Ingeniería Química en una serie de competencias CE7-T, de la cuales corresponden a esta asignatura las siguientes:

- **CE7-T1:** Aplicar los Principios de la Termodinámica en diferentes tipos de sistemas.
- **CE7-T2:** Plantear los criterios de equilibrio y estabilidad de los sistemas y saber aplicarlos a los equilibrios de fases, al equilibrio y a la combustión.
- **CE7-T3:** Calcular los parámetros y variables que definen el equilibrio entre fases y el equilibrio químico.
- **CE7-T4:** Plantear las ecuaciones cinéticas de una reacción química.
- **CE7-T5:** Resolver mecanismos de reacción conocida su cinética.
- **CE7-T6:** Diferencias entre células galvánicas y electrolíticas.
- **CE7-T7:** Estudiar en el laboratorio la cinética de una reacción.
- **CE7-T8:** Montar diferentes células galvánicas.

■ TRANSVERSALES:

Las competencias transversales del título, CT, que se desarrollan en el módulo de Ingeniería Industrial, CT-II, y que son de aplicación en la presente asignatura son las siguientes:

- **CT4-II1:** Comunicarse en español utilizando los medios audiovisuales habituales.
- **CT5-II1:** Consultar, utilizar y analizar fuentes bibliográficas.
- **CT5-II2:** Usar bibliografía y bases de datos especializadas y recursos accesibles a través de Internet.
- **CT6-II1:** Utilizar programas informáticos para calcular, diseñar, simular, aproximar y predecir.
- **CT7-II1:** Trabajar en equipo.
- **CT9-II1:** Demostrar compromiso ético profesional.
- **CT11-II:** Aprender de forma autónoma.
- **CT13-II1:** Demostrar iniciativa y creatividad para resolver nuevas situaciones.



VI. – HORAS DE TRABAJO Y DISTRIBUCIÓN POR ACTIVIDAD

Actividad	Presencial (horas)	Trabajo autónomo (horas)	Créditos
Clases teóricas	45	82	5,1
Seminarios	15	20,5	1,4
Tutorías/Trabajos dirigidos	2	3	0,2
Laboratorios	16	11,5	1,0
Preparación de trabajos y exámenes	6	24	1,2
Total	84	141	9

VII.- METODOLOGÍA

La práctica docente seguirá una metodología mixta basada en el aprendizaje cooperativo, en el aprendizaje colaborativo y en el autoaprendizaje, lo que implica clases teóricas, seminario en grupos con resolución y discusión de cuestiones y problemas y sesiones prácticas de laboratorio. A ello se añaden actividades del alumno dirigidas y supervisadas por el profesor, incluyendo el trabajo bibliográfico correspondiente, para lo que será de gran utilidad el Campus Virtual.

Las lecciones se impartirán en las correspondientes clases teóricas, apoyadas en clases de seminarios donde se resolverán, en grupos más pequeños, problemas numéricos y cuestiones y en las tutorías dirigidas que se indican. Adicionalmente, se realizará un laboratorio en el que se pongan en práctica los conocimientos adquiridos en las clases teóricas, con énfasis en el desarrollo de habilidades en el manejo de equipos experimentales, en la obtención de datos experimentales y en el análisis de los mismos utilizando las herramientas matemáticas apropiadas.

VIII.- BIBLIOGRAFÍA

■ BÁSICA:

- Rodríguez Renuncio, J.A.; Ruiz Sánchez, J.J.; Urieta, J.S.: “*Termodinámica Química*”, 2ª ed., Síntesis, Madrid, 2000.
- Smith, J.M., Van Ness, H.C., Abbott, M.M.: “*Introducción a la Termodinámica en Ingeniería Química*”, 7ª ed., McGraw Hill, México, 2007.
- González Ureña, A.: “*Cinética Química*”, Síntesis, Madrid, 2001.
- Logan, S.R.: “*Fundamentos de Cinética Química*”, Addison Wesley, 2000.

■ COMPLEMENTARIA:

- Atkins, P.W.: “*Physical Chemistry*”, 8ª ed., Freeman, 2008.
www.whfreeman.com/pchem8



- Sonntag, R.E., Borgnakke, C.: “*Introducción a la Termodinámica para Ingeniería*”, Limusa-Wiley, México, 2006
- Keeler, J.; Wothers, P.: “*Chemical Structure and Reactivity*”, Oxford U.P., 2008.
- Rodríguez Renuncio J.A.; Ruiz Sánchez, J.J.; Urieta, J.S.: “*Problemas resueltos de Termodinámica Química*”, Síntesis, Madrid, 2000.
- Pellicer, J.; Manzanares, J.A.: “*100 problemas de Termodinámica*”, Alianza, 1996.

Los guiones de las prácticas y el material auxiliar que se considere necesario estarán a disposición del estudiante en el Campus Virtual de la asignatura. Además de los textos básicos y complementarios, puntualmente, se podrá indicar a los estudiantes bibliografía específica para cada tema.

IX.- EVALUACIÓN

Tanto las tutorías dirigidas como las prácticas de laboratorio son obligatorias. Para poder realizar el examen final será necesario que el alumno haya participado al menos en el 70% de las actividades presenciales. La calificación final tendrá en cuenta los criterios que se indican a continuación. Estos **criterios** se mantendrán en todas las convocatorias.

■ EXÁMENES ESCRITOS: 70%

Se realizará un examen escrito sobre los contenidos teóricos, seminarios y prácticas de la asignatura que contabilizará un 70% de la calificación final, tanto en la convocatoria de junio como en la de septiembre. En el examen escrito será requisito imprescindible para poder promediar con las restantes actividades obtener una calificación mínima de 4 sobre 10.

Se evaluarán las competencias CG1-MII1, CG1-MII7, CE7-T1, CE7-T2, CE7-T3, CE7-T4, CE7-T5, CE7-T6, CT11-II y CT13-II1.

■ TRABAJO PERSONAL: 5%

El trabajo personal evaluado a través de las tutorías y la participación activa en las clases teóricas y de seminarios contabilizará un 5% de la calificación final.

Se evaluarán las competencias CG1-MII1, CG1-MII7, CE7-T1, CE7-T2, CE7-T3, CE7-T4, CE7-T5, CE7-T6, CT4-II1, CT11-II y CT13-II1.

■ ACTIVIDADES DIRIGIDAS (TRABAJO): 5%

Se valorarán los trabajos realizados en las tutorías dirigidas, así como la participación activa en las mismas con un 5% de la calificación final.

Se evaluarán las competencias CG1-MII1, CG1-MII7, CE7-T1, CE7-T2, CE7-T3, CE7-T4, CE7-T5, CE7-T6, CT4-II1, CT5-II1, CT5-II2, CT7-II1, CT9-II1, CT11-II y CT13-II1.

■ LABORATORIO: 20%

La participación activa en las actividades del laboratorio, así como el grado de comprensión de las prácticas realizadas y las habilidades adquiridas en el laboratorio



junto con la memoria presentada al final del mismo contabilizarán un 20% de la calificación final.

Para poder aprobar la asignatura será requisito imprescindible haber realizado y aprobado el laboratorio. Los alumnos que habiendo suspendido el laboratorio hayan realizado un examen escrito en la convocatoria de septiembre con calificación mínima de 4 sobre 10, serán convocados para llevar a cabo un examen de laboratorio.

Aquellos alumnos que, habiendo realizado y aprobado el laboratorio, no aprueben la asignatura, estarán exentos de repetir el laboratorio el curso académico siguiente a aquél en que lo hubieran aprobado, manteniendo la calificación correspondiente.

Se evaluarán las competencias CG1-MII1, CG1-MII7, CE7-T2, CE7-T3, CE7-T4, CE7-T6, CE7-T7, CE7-T8, CT4-II1, CT5-II1, CT5-II2, CT6-II1, CT7-II1, CT9-II1, CT11-II y CT13-II1.



PLANIFICACIÓN DE ACTIVIDADES – CRONOGRAMA

TEMA	ACTIVIDAD	HORAS	GRUPOS	INICIO	FIN
1. Fundamentos de la Termodinámica	Clases Teoría	15	1	1ª Semana	5ª Semana
	Clases Problemas	5	2		
		Tutoría programada*	1	4	6ª Semana
2. Termodinámica Química	Clases Teoría	15	1	6ª Semana	10ª Semana
	Clases Problemas	5	2		
3. Cinética Química	Clases Teoría	8	1	11ª Semana	13ª Semana
	Clases Problemas	3	2		
	Tutoría programada*	1	4	12ª Semana	
4. Electroquímica. Superficies e Interfases	Clases Teoría	7	1	13ª Semana	15ª Semana
	Clases Problemas	2	2		
Laboratorio	Sesiones Prácticas	16	3	4ª Semana	7ª Semana

* Las tutorías programadas están sujetas a posibles modificaciones según la planificación conjunta del curso.



RESUMEN DE LAS ACTIVIDADES

Actividad docente	Competencias asociadas	Actividad Profesor	Actividad alumno	Procedimiento de evaluación	P	NP	Total	C
Clases de teoría	CG1-MII1, CG1-MII7 CE7-T1, CE7-T2, CE7-T3, CE7-T4, CE7-T5, CE7-T6, CE7-T7, CE7-T8 CT5-II1, CT5-II2, CT9-II1, CT11-II1	Exposición de conceptos teóricos, planteamiento de cuestiones para la resolución por el alumno y recomendaciones bibliográficas.	Participación activa en las actividades de clase, toma de apuntes y estudio de los mismos, así como de las recomendaciones bibliográficas realizadas por el profesor.	Valoración de la participación en las actividades de clase y calificación de las respuestas realizadas oralmente o por escrito a preguntas relacionadas con los conceptos teóricos explicados.	45	82	127	5%
Seminarios	CG1-MII1, CG1-MII7 CE7-T1, CE7-T2, CE7-T3, CE7-T4, CE7-T5, CE7-T6, CE7-T7, CE7-T8 CT5-II1, CT5-II2, CT9-II1, CT11-II1	Aplicación de la teoría a la resolución de ejercicios y problemas. Planteamiento de ejercicios prácticos y problemas numéricos para la resolución por el alumno.	Participación activa en las actividades de clase, toma de apuntes y estudio de los mismos. Resolución de los ejercicios y problemas propuestos por el profesor.	Valoración de la participación en las actividades de clase y calificación de las respuestas (planteamiento y resultado) realizadas oralmente o por escrito a la resolución de ejercicios prácticos y problemas numéricos propuestos.	15	20,5	35,5	
Tutorías	CT4-II1, CT5-II1, CT5-II2, CT9-II1, CT11-II1, CT13-II1	Ayuda al alumno a dirigir su estudio. Recomendaciones didácticas. Resolución de dudas. Recomendaciones bibliográficas.	Consulta al profesor sobre las dificultades conceptuales y metodológicas que encuentra al estudiar la materia.					



Actividad docente	Competencias asociadas	Actividad Profesor	Actividad alumno	Procedimiento de evaluación	P	NP	Total	
Tutorías dirigidas	CE7-T1, CE7-T2, CE7-T3, CT4-II1, CT5-II1, CT5-II2, CT6-II1, CT7-II1, CT9-II1, CT11-II1, CT13-II1	Elaboración y propuesta de trabajos.	Participación activa en las actividades propuestas. Elaboración por escrito de trabajos individuales y presentación de los mismos	Valoración de la participación en las actividades dirigidas y calificación del trabajo propuesto por escrito y de la presentación oral del mismo.	2	3	5	5%
Laboratorios	CG1-MII1, CG1-MII7 CE7-T1, CE7-T2, CE7-T3, CE7-T4, CE7-T5, CE7-T6, CE7-T7, CE7-T8 CT5-II1, CT5-II2, CT6-II1, CT7-II1, CT9-II1, CT11-II1, CT13-II1	Organización y planificación de las prácticas de laboratorio, explicaciones al alumno de los contenidos de las mismas y los procedimientos y protocolos prácticos necesarios para su desarrollo. Explicación al alumno de la interrelación con los contenidos de la asignatura.	Realización del laboratorio y participación activa en el desarrollo del mismo. Estudio de los contenidos teórico-prácticos del laboratorio. Elaboración de los resultados obtenidos y de una memoria de las prácticas realizadas.	Valoración de la participación en las actividades del laboratorio y calificación de la memoria presentada por el alumno. A través de pequeñas cuestiones realizadas al alumno, valoración del grado de comprensión alcanzado por el alumno sobre los contenidos y las habilidades prácticas desarrolladas.	16	11,5	27,5	20%
Exámenes	CG1-MII1, CG1-MII7 CE7-T1, CE7-T2, CE7-T3, CE7-T4, CE7-T5, CE7-T6, CE7-T7, CE7-T8 CT13-II1	Propuesta, vigilancia y corrección del examen.	Preparación y realización de los exámenes propuestos.	Calificación de los exámenes.	6	24	30	70%

P : Presenciales; NP: no presenciales (trabajo autónomo); C: calificación