1. ASIGNATURA / COURSE

1.1. Nombre / Course Title

FUNDAMENTOS DE TERMODINÁMICA / FUNDAMENTALS OF THERMODYNAMIC

1.2. Código / Course Code

12691

1.3. Tipo / Type of Course

Obligatoria / Compulsory

1.4. Nivel / Level of Course

Grado / Grade

1.5. Curso / Year of Course

Primero / First course

1.6. Semestre / Semester

2º

1.7. Número de Créditos / Number of Credits Allocated

4 créditos LRU, 3 ECTS / 4 LRU credits, 3 ECTS

1.8. Requisitos Previos / Prerequisites

No hay requisitos previos para la matriculación, pero para alcanzar satisfactoriamente los objetivos de esta asignatura es recomendable tener afianzados los conocimientos de Química y de Cálculo correspondientes a todos los cursos de Educación Secundaria.

1.9. ¿Es Obligatoria la Asistencia? / Is Attendance to Class Mandatory?

Si / Yes

1.10. Datos del Profesor/a / Profesores / Faculty Data

Grupo: 11
Pilar Herrasti González

Departamento: Química Física Aplicada, UAM
Facultad de Ciencias, Despacho C-II, 503
Teléfono: 91 497 4831
e-mail: pilar.herrasti@uam.es
Página Web:
Horario de Tutorías Generales: Mañana y tarde, previa petición de cita

Grupo: 12
Cristina Díaz Oliva

Departamento: Química Física Aplicada, UAM
Facultad de Ciencias, Despacho C-XIV, 400-b
Teléfono: 91 497 2914
e-mail: cristina.oliva@uam.es
Página Web:
Horario de Tutorías Generales: Mañana y tarde, previa petición de cita

Grupo: 16
Javier Zuluaga Arias

Departamento: Química Física Aplicada, UAM
Facultad de Ciencias, Despacho C-II, 303
Teléfono: 91 497 4700
e-mail: javier.zuluaga@uam.es
Página Web:
Horario de Tutorias Generales: Mañana y tarde, previa petición de cita

1.11. Objetivos del Curso / Objective of the Course

Objetivos de la Asignatura

- Adquirir los conocimientos teóricos y prácticos necesarios para abordar el estudio del comportamiento macroscópico de la materia, a través de la aplicación de los principios de la Termodinámica Clásica.
- Conocer las principales funciones termodinámicas que controlan la espontaneidad y el equilibrio en las transformaciones químicas y fisicoquímicas.

- Adquirir un conocimiento básico sobre la relación existente entre las propiedades macroscópicas de un sistema químico y la estructura microscópica del mismo.

Capacidades a desarrollar

- Capacidad para definir el estado de un sistema químico en función de sus propiedades macroscópica, y analizar la evolución espontánea del mismo.
- Comprender y utilizar la información bibliográfica y técnica referida a los fenómenos termodinámicos
- Se fomentará la lectura de textos científicos y de divulgación en español e inglés
- Se fomentará el trabajo en grupo

Los conocimientos adquiridos deben servir, así mismo, para abordar el estudio de otras asignaturas incluidas en el Plan de Estudios, para cuyo desarrollo y comprensión es necesario conocer la estructura formal y la metodología de la Termodinámica Química.

1.12. Contenidos del Programa / Course Contents

BLOQUE I: PROPIEDADES TERMODINÁMICAS. ESPONTANEIDAD Y EQUILIBRIO

Contenidos Teóricos y Prácticos

1. Primer Principio
   Conceptos previos: sistemas termodinámicos, propiedades termodinámicas, ecuaciones de estado, temperatura. Principio Cero de la Termodinámica. Conceptos de trabajo y calor. Cálculo del trabajo en procesos sencillos de sistemas cerrados. El Primer Principio de la Termodinámica. Definición de energía interna. Definición de entalpía. Capacidades caloríficas a presión y a volumen constante. Cálculo de la variación de energía interna y de entalpía en procesos sencillos de sistemas cerrados.
2. Segundo y Tercer Principio
   Segundo Principio de la Termodinámica. Definición de entropía. Reversibilidad e irreversibilidad. Desigualdad de Clausius. Cálculo de la variación de entropía en procesos sencillos de sistemas cerrados. Enunciado del Tercer Principio. Entropía y rendimiento de las máquinas térmicas. Entropía y probabilidad: Interpretación molecular de la entropía.

3. Espontaneidad y equilibrio
   Condiciones generales de equilibrio y espontaneidad. Funciones de Helmholtz y Gibbs. Relaciones termodinámicas de un sistema cerrado en equilibrio. Ecuaciones de Gibbs. Potencial químico. Potencial químico de un gas ideal puro. Potencial químico de un gas ideal en una mezcla de gases ideales.

Objetivos y Capacidades a Desarrollar

- Conocer las principales funciones termodinámicas así como su interdependencia.
- Conocer los Principios de la Termodinámica Clásica
- Conocer las condiciones generales de equilibrio termodinámico
- Ser capaz de evaluar el cambio en las funciones de estado en procesos sencillos de sistemas gaseosos cerrados.
- Poder identificar cuando un sistema se encuentra en equilibrio termodinámico y en caso contrario predecir en qué sentido evolucionará espontáneamente

BLOQUE II: TRANSFORMACIONES Y EQUILIBRIO QUÍMICO.

Contenidos Teóricos y Prácticos

4. Termoquímica
   Cambios de entalpía estándar de reacción. Leyes termoquímicas (ley de Hess). Influencia de la temperatura en las entalpías de reacción (ecuación de Kirchhoff). Relación entre la variación de entalpía y la variación de energía interna en una reacción. Variación de la entropía y energía libre en una reacción química.
5. Equilibrio Químico
   Equilibrio químico. Constante de equilibrio. Dependencia de la constante de equilibrio con la temperatura. Desplazamiento del punto de equilibrio químico: Efecto de la temperatura, de la presión, del volumen y de la composición de la mezcla reactiva.

Objetivos y Capacidades a Desarrollar

- Definir las funciones termodinámicas en un sistema químico cerrado.
- Aplicar los Principios de la Termodinámica a sistemas en los que ocurren reacciones químicas, evaluando el cambio en las funciones de estado cuando estas tienen lugar.
- Aprender a identificar cuando una mezcla reactiva (sistema químico) se encuentra en equilibrio termodinámico y en caso contrario predecir en qué sentido evolucionará espontáneamente

- Deducción de la constante de equilibrio de una reacción química a partir de las propiedades termodinámicas del sistema
- Conocer el efecto que sobre la composición química del sistema tiene el modificar concentración de productos o reactivos, presión, temperatura o volumen
- Ser capaz de utilizar las Tablas de Datos Termodinámicos para determinar si una reacción química va a tener lugar en determinadas condiciones, y cual será la composición química del sistema una vez se alcance el equilibrio químico

BLOQUE III: TRANSFORMACIONES Y EQUILIBRIO MATERIAL DE SUSTANCIAS PURAS Y SISTEMAS DE DOS COMPONENTES

Contenidos Teóricos y Prácticos

6. Equilibrio material entre fases. Sustancia pura
   Condición de equilibrio material entre fases. Regla de las fases. Diagramas de fase en sistemas de un componente. Variación de las funciones de estado en los cambios de fase. Efecto de la presión y de la temperatura: ecuación de Clapeyron. Aplicación de la ecuación de Clapeyron a distintos tipos de cambio de fase.
7. Equilibrio material entre fases: Sistema de dos componentes
   Equilibrio de fases en sistemas multicomponentes: equilibrio líquido-líquido, líquido-gas y sólido-líquido en mezclas binarias. Diagramas de fase.

Objetivos y Capacidades a Desarrollar

- Definir las funciones termodinámicas en un sistema cerrado compuesto por una o varias fases.
- Aplicar los Principios de la Termodinámica a sistemas en los que pueden ocurrir cambios de fase, evaluando el cambio en las funciones de estado cuando estas tienen lugar.
- Aprender a identificar cuando una mezcla de fases se encuentra en equilibrio termodinámico y en caso contrario predecir en qué sentido evolucionará espontáneamente
- Ser capaz de dibujar y de interpretar los diagramas de fases en sistemas formados por un único componente y por dos componentes.
- Conocer el efecto que sobre la composición del sistema tiene el modificar presión, temperatura o volumen

1.13. Referencias de Consulta Básicas / Recommended Reading

- ENGEL, T. y REID, P., *Química Física*, Ed. Pearson Educación S.A., Addison Wesley, 2006
- ATKINS, P. y DE PAULA J., *Physical Chemistry*, 8va edición, Oxford U.P., 2006
- LEVINE, I.N., *Fisicoquímica Volumen 1*, 5a Edición, 2004, Ed. McGraw-Hill Inc./Interamericana de España, S.A.U, 2004
- RODRÍGUEZ RENUNCIO, J.A., RUIZ SÁNCHEZ, J.J. y URIETA J.S., *Termodinámica Química*, Ed. Síntesis, 1998

Libros de Problemas

- LABOWITZ, L.C., *Fisicoquímica problemas y soluciones*, Ed. Libros Científicos y Técnicos, 1974
- ATKINS, P.W., *Students Solutions Manual for Physical Chemistry*, 6ta edición, Oxford U.P., 1998
- ADAMSON, A.W., *Problemas de Química-Física*, Ed. Reverté,1974

Página Web de la Asignatura: http://joule.qfa.uam.es

Nota adicional

Puesto que la asignatura FUNDAMENTOS DE TERMODINÁMICA está encuadrada dentro del Primer Curso de la Licenciatura en Química, puede ser conveniente hacer una primera aproximación a cada uno de Bloques de la misma, leyendo los temas relacionados en algún texto de Química General, especialmente aquellos estudiantes que por los motivos que fuere no cursaron la asignatura de Química en los cursos del Bachillerato.

Algunos textos adecuados podrían ser:

- REBOIRAS, M.D., *Química. La Ciencia Básica*, Ed. Thomson, 2006
- PETRUCCI, R.H., *Química General*, Ed. Prentice Hall, 2003
- ATKINS, P. y JONES, L., *Chemical Principles. The Quest for Insight*, Ed. W.H. Freeman and Co., N.Y, 1999

2. Métodos Docentes / Teaching Methods

Cada uno de los temas en los que se ha dividido el contenido de la asignatura será presentado por el profesor con ayuda de proyecciones, en dos sesiones por término medio, incidiendo en los conceptos clave para su comprensión. Es importante haber leído con antelación algún texto en relación al tema a tratar, con el fin de que las clases puedan ser interactivas. Además de la bibliografía recomendada, de la que existen numerosos ejemplares en la Biblioteca de la UAM, se ha elaborado una página Web de la Asignatura, donde se resumen los principales contenidos de la misma. Los estudiantes dispondrán de una completa colección de problemas seleccionados y sus soluciones, alguno de los cuales servirá para ilustrar los conceptos teóricos a medida que se vayan exponiendo.

Aproximadamente el cuarenta por ciento de las clases presenciales será de carácter práctico. En algunas sesiones el profesor, mediante la resolución de problemas-tipo explicará cómo realizar el planteamiento de los mismos y llevar a cabo su resolución. Una hora a la semana, en seminarios-taller, aproximadamente 20 estudiantes trabajarán de forma individual y/o en grupo, supervisados por el profesor, alguno de los problemas y cuestiones propuestos previamente, y que presentarán una mayor complejidad. Una vez resueltos, algunos de estos problemas serán corregidos y analizados por los estudiantes en la pizarra. En ocasiones el profesor propondrá la resolución de algún problema que los estudiantes resolverán de forma autónoma, y que posteriormente el profesor devolverá corregido. Por otra parte, y durante el periodo de una semana desde la finalización de cada uno de los temas, cada estudiante tendrá acceso vía telemática a una serie de ejercicios de autoevaluación.

El estudiante será atendido en tutorías individuales o colectivas siempre que estime oportuno, en ellas el profesor le orientará en asuntos relacionados con su aprendizaje. Del mismo modo, el profesor también podrá solicitar del estudiante su asistencia a alguna tutoría.

- **Actividades Presenciales**

  - <u>Clases teóricas</u>
    Entre 15 y 20 horas. Habrá una clase a la semana y otra cada quince días. Se emplearán principalmente para presentar los contenidos de los temas en los que se ha estructurado la asignatura, y aclarar las dudas generales y dificultades que puedan tener los estudiantes.

- Clases prácticas
  Aproximadamente 15 horas. En ellas el estudiante, participará activamente de forma individual y/o en grupo, resolviendo cuestiones y problemas propuestos por el profesor.

- **Actividades Dirigidas**

  - Docencia en red
    Los alumnos dispondrán de apuntes, problemas y de las presentaciones que de los temas hará el profesor. Además a través de la red realizarán los ejercicios de autoevaluación propuestos.

  - Tutorías
    Es conveniente que los estudiantes asistan al menos a dos tutorías a lo largo del curso. Dada la naturaleza de la materia a estudiar, y aunque los estudiantes siempre pueden comunicarse con el profesor vía correo electrónico, las tutorías virtuales no parecen adecuadas.

3. Tiempo Estimado de Trabajo del Estudiante / Estimated Workload for The Student

El estudiante asistirá a treinta y cinco clases presenciales de una hora, incluyendo clases teóricas y prácticas (35h)

Antes de la exposición en clase de cada uno de los temas en los que se ha estructurado la asignatura, siete en total, el estudiante deberá emplear aproximadamente una hora para leer detenidamente el mismo en algún libro de los textos recomendados. (7h)

Después de la exposición de cada tema el estudiante deberá profundizar y afianzar los nuevos conceptos. Para lo cual deberá dedicar unas dos horas para la lectura, elaboración de apuntes personales y/o realización de esquemas y estudio, según su método de trabajo. (14h)

Un elemento fundamental para el aprendizaje de esta materia es la resolución de problemas. En general el estudiante deberá dedicar por término medio y de forma autónoma unas tres horas a la realización de problemas del tipo de los propuestos por el profesor en cada uno de los capítulos. Con ello afianzará

los conocimientos necesarios para afrontar con éxito los ejercicios de autoevaluación, y que por término medio le llevarán otra hora. (28h).

La asistencia a tutorías puede ser por término medio de 1 o 2 horas a lo largo del curso

En la realización de pruebas presenciales de evaluación durante el curso se emplearán aproximadamente 6 horas.

Los tiempos que aquí se detallan son estimaciones promedio y recomendaciones. Alguno de los temas de esta asignatura requerirá un tiempo inferior de trabajo autónomo del estudiante y otros requerirán tiempos superiores. No hay un tiempo dedicado específicamente a la preparación de exámenes, porque creemos que si se siguen estas recomendaciones de trabajo, no habrá que dedicar un tiempo específico a preparar los mismos.

4. Métodos de Evaluación y Porcentaje en la Calificación Final / Assessments Methods and Percentage in the Final Marks

- **Descripción detallada del procedimiento para la evaluación.**
  El aprendizaje y la formación adquirida por el estudiante serán evaluados a lo largo de todo el curso a partir de los ejercicios de autoevaluación que resolverá de forma individual al finalizar cada uno de los temas en los que se organiza la asignatura, y a cuyos resultados tendrá acceso el profesor. Además se evaluará la participación de los estudiantes en los seminarios, así como la resolución individual de los ejercicios y cuestiones que en ellos se planteen. La calificación así obtenida supondrá el 20% de la calificación final.

  A lo largo del curso se realizarán dos pruebas presenciales de una hora y media aproximada de duración, y cuya calificación corresponderá al 30% de la calificación final. Estas pruebas se harán fuera del horario de las clases programadas.
  Por último se realizará un examen final de la asignatura global (teoría y problemas) al finalizar el semestre, dentro del Calendario establecido por Ordenación Académica y que supondrá el 50% de la calificación.

En la convocatoria extraordinaria de septiembre se considerará únicamente el examen realizado en la fecha establecida, y que por tanto supondrá el 100% de la calificación.

Los estudiantes podrán utilizar tanto en los talleres de problemas como en las pruebas de evaluación y exámenes finales, un formulario manuscrito de un folio, que se entregará junto con los exámenes, y en el que no podrá haber ni ejemplos ni explicaciones sobre las condiciones para la aplicación o interpretación de las ecuaciones.

- **Porcentaje en la calificación final**

Convocatoria ordinaria de Junio:

- Evaluación del trabajo en seminarios y ejercicios de autoevaluación: 20%
- Pruebas exámenes parciales de: 30%
- Examen final: 50%

Convocatoria extraordinaria de Septiembre:

- Examen: 100%

5. Cronograma de Actividades (opcional) / Activities Chronogram (optional)

Los tiempos en semanas de este cronograma pueden variar ligeramente.

- Semana 1-2 Primer Principio
- Semana 3-4 Segundo y Tercer Principio
- Semana 5-7 Espontaneidad y Equilibrio
- Semana 8-9 Termoquímica
- Semana 10-11 Equilibrio Químico
- Semana 12-13 Equilibrio Material entre Fases. Sustancia pura
- Semana 14 Equilibrio Material entre Fases. Sist. de dos componentes.