

TERMODINÀMICA I CINÈTICA QUÍMICA

Ciències Ambientals, Curs 1999-00, 2n Quatrimestre

1. Conceptes bàsics de termodinàmica.

Termodinàmica i energia. Magnituds i unitats. Sistemes termodinàmics. Formes d'energia. Propietats de sistema. Estat i equilibri. Processos i cicles.

2. Les propietats dels gasos.

El gas ideal. Pressió. Temperatura. Principi zero de la termodinàmica. Les lleis dels gasos ideals. Gasos reals. L'equació de van der Waals. Principi dels estats corresponents.

3. La 1a llei de la Termodinàmica.

Calor i treball. La 1a llei i l'energia interna. Capacitat calorífica. Entalpia. Canvis adiabàtics.

4. Termoquímica.

Calor i entalpia de reacció. Condicions estàndard. Llei de Hess. Entalpia estàndard de formació. Dependència de l'entalpia de reacció amb la temperatura. Energia d'enllaç.

5. Relacions matemàtiques derivades de la 1a llei.

L'experiment de Joule. Canvis d'energia interna a pressió constant. Dependència de l'entalpia amb la temperatura. L'efecte Joule-Thomson. La relació entre capacitats calorífiques.

6. La 2a llei de la termodinàmica.

Esponaneïtat d'un procés. Entropia: concepte i definició termodinàmica. L'entropia com a funció d'estat. La temperatura termodinàmica. La desigualtat de Clausius. Exemples. La 3a llei de la termodinàmica. Energies de Gibbs i de Helmholtz.

7. La 2a llei. Qüestions aplicades.

Combinació de 1a i 2a llei. Propietats de l'energia interna. Relacions de Maxwell. Propietats de l'energia de Gibbs. El potencial químic. La fugacitat dels gasos reals.

8. L'equilibri material.

Regla de les fases. Pressió de vapor. L'equació de Clapeyron: volatilització de contaminants. Sistemes de dos components. Dissolucions ideals. Llei de Raoult. Llei d'Henry: solubilitat de gasos atmosfèrics en el medi aquàtic. Dissolucions reals. Propietats col·ligatives. Equilibri de fases en sistemes de mes d'un component.

9. L'equilibri químic.

Característiques fenomenològiques de l'equilibri químic. Condició d'equilibri d'una reacció. Equilibri en mescles de gasos. Càlculs d'equilibri en reaccions entre gasos ideals. Influència de la temperatura en l'equilibri. Desplaçament de l'equilibri químic. Equilibri en sistemes heterogenis ideals.

10. Velocitat d'una reacció.

Aspectes termodinàmics i cinètics d'una reacció químic. Equació de velocitat. Ordre de reacció. Constant de velocitat. Equacions integrades de velocitat.

10. Mecanismes de reacció.

Reaccions elementals. Molecularitat. Processos en varies etapes. L'etapa determinant de velocitat d'una reacció. Constants de velocitat i constants d'equilibri. Dependència de la constant de velocitat amb la temperatura. Teoria d'Arrhenius.

11. Processos químics atmosfèrics.

Reaccions fotoquímiques: fluorescència, fosforescència. Processos radicalaris: radicals en l'atmosfera.
Catàlisi homogènia: processos catalítics atmosfèrics. Catàlisi heterogènia: partícules sòlides a l'atmosfera.

Bibliografia recomanada

- E. Brillas, R.M. Bastida, F. Centellas i X. Domènech, *Fonaments de Termodinàmica, Electroquímica i Cinètica*. Ed. Barcanova. Barcelona. 1992.
- I. N. Levine, *Fisicoquímica*, Volum I, McGraw Hill, 1996.
- P.W. Atkins, *Physical Chemistry*, Oxford University Press, 1998.
- O. Levenspiel, *Understanding Engineering Thermo*, Prentice Hall, 1996.
- Y.A. Çengel, M.A. Boles, *Thermodynamics, an Engineering Approach*, McGraw Hill, 1989.

Professor: José Peral

Despatx: C7-130