



Universitat Autònoma de Barcelona

TITULACIÓ: Química

NOM DE L'ASSIGNATURA: 20552 Química física I

CURS: 2002/2003

CRÈDITS: 4.5

- 1r principi de la termodinàmica.

Sistemes termodinàmics. Equacions d'estat. Gasos ideals. Gasos reals. Calor i treball. Processos reversibles i irreversibles. Primer principi de la termodinàmica. Energia interna. Entalpia. Capacitat calorífica.

- Termoquímica.

Entalpies de reacció i de formació. Estats de referència. Llei de Hess. Dependència de les entalpies de reacció amb la temperatura. Llei de Kirchoff. Entalpies d'enllaç. Mesures calorimètriques d'entalpies de reacció.

- Segon principi de la termodinàmica.

Segon principi de la termodinàmica. Entropia. Variació de l'entropia en alguns processos. Tercer principi de la termodinàmica. Entropies de reacció.

- Condicions d'equilibri en sistemes tancats.

Funcions de Helmholtz i de Gibbs. Criteris d'espontaneïtat i d'equilibri en sistemes tancats. Treball útil i energia de Gibbs. Equacions termodinàmiques d'estat. Dependència de la funció de Gibbs respecte a la pressió i la temperatura. Equació de Gibbs. Helmholtz. Energia de Gibbs de reacció.

- Sistemes de composició variable. Potencial químic.

Potencial químic. Criteris d'espontaneïtat i d'equilibri. Potencial químic de gasos ideals i reals. Fugacitat.

- Equilibri de fases en sistemes d'un component.

Fases i components. Regla de les fases. Diagrama de fases en sistemes d'un component. Equació de Clapeyron.

- Dissolucions.

Propietats molars parcials. Termodinàmica de mescles. Concepte de dissolució ideal. Llei de Raoult. Potencial químic d'una dissolució ideal. Dissolució diluïda ideal. Llei de Henry. Elecció dels estats de referència. Propietats col·ligatives: ebulloscòpia, crioscòpia i pressió osmòtica. Llei de distribució de Nernst. Dissolucions reals. Concepte d'activitat.

- Equilibri de fases en sistemes de més d'un component.

Sistemes de dos components equilibri líquid-vapor. Destil·lació. Equilibri líquid-líquid. Equilibri líquid-sòlid.

- Equilibri químic.

Condicció d'equilibri químic. Equilibri químic en sistemes gasosos homogenis. Constant d'equilibri. Dependència de la constant d'equilibri respecte a la pressió i la temperatura. Equació de Van't Hoff. Principi de Le Chatelier. Equilibris heterogenis. Equilibri químic en dissolució.

- Equilibri electroquímic.

Dissolucions d'electròlits. Coeficient d'activitat iònica mitjà. Sistemes electroquímics: diferència de potencial entre fases. Elèctrodes reversibles. Piles. Força electromotriu. Potencial estàndard. Equació de Nernst. Càlcul de la constant d'equilibri. Aplicacions.