

TERMODINAMICA i CINETICA QUIMICA

Curs 2003-04.

1. Introducció.

L'Energia. Consum energètic i transformació de matèries primeres. Fonts químiques d'energia. Energia útil. Les Lleis de la Termodinàmica.

Termodinàmica

2. Introducció.

Sistemes termodinàmics. Equacions d'estat. Gasos ideals. Mescles. L'aire: composició i propietats. Unitats de concentració de gasos atmosfèrics. Gasos reals. L'equació de Van der Waals. Principi dels estats corresponents.

3. Primer Principi

Calor i treball. Procesos reversibles i irreversibles. Energia interna. Primer principi de la Termodinàmica. Entalpia. Càlculs amb gasos ideals.

4. Calor de reacció.

Entalpia de reacció. Entalpia estàndard. Llei de Hess. Entalpia estàndard de formació. Capacitat calorífica. Dependència de l'entalpia de reacció amb la temperatura. Entalpies d'enllaç.

5. Segon Principi

Reversibilitat i espontaneïtat. Màquines tèrmiques. Segon Principi. L'entropia. Càlculs d'entropia. Entropies absolutes. Tercer principi. Entropia de reacció.

6. Espontaneïtat i equilibri material

Energies de Gibbs i de Helmholtz. Criteris de canvis espontanis i reversibles. Equacions fonamentals de Gibbs. Energia de Gibbs de reacció. Sistemes de composició variable. Potencial químic

Equilibri Químic

7. Equilibri de fases.

Condició d'equilibri de fases. Diagrama de fases d'una substància pura. L'equació de Clapeyron: volatilització de contaminants. Dissolucions ideals. Llei de Raoult. Llei d'Henry: solubilitat de gasos atmosfèrics en el medi aquàtic. Repartiment d'un solut entre fases. Propietats col·ligatives. Osmosi.

8. L'equilibri químic.

Condició d'equilibri d'una reacció. Equilibri en reaccions gasoses. Constant termodinàmica d'equilibri. Influència de la temperatura en l'equilibri: equació de Van't Hoff Desplaçament de l'equilibri químic. Equilibri en sistemes heterogenis.

9. Equilibri iònic

Tipus d'electròlits. Teoria d'Arrhenius. Conductivitat elèctrica de dissolucions iòniques:

conductivitat específica i molar. Grau de dissociació. Propietats col·ligatives de dissolucions d'electròlit. Potencial químic de dissolucions d'electròlit: coeficient d'activitat iònica

Cinètica Química

10. Lleis fonamentals de la cinètica química

Aspectes termodinàmics i cinètics d'una reacció química. Velocitat de reacció. Equació de velocitat: Ordre de reacció i constant de velocitat. Equacions integrades de velocitat. Reaccions complexes

9. Mecanismes de reacció.

Reaccions elementals. Molecularitat. Processos en vèries etapes. Determinació del mecanisme d'una reacció: aproximació de l'estat estacionari i aproximació de l'etapa determinant de velocitat. Dependència de la constant de velocitat amb la temperatura. Teoria d'Arrhenius.

10. 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 recomenada

- E. Brillas, R.M. Bastida, F. Centellas i X. Domènech, "Fonaments de Termodinàmica, Electroquímica i Cinètica". Ed. Barcanova. Barcelona. 1992.
- I.N. Levine, "Fisicoquímica". McGraw Hill.1996.
- P.W. Atkins, "Fisicoquímica".Addison Wesley. 1991.

Prof.Teoría: Xavier Domènech

Profs. Problemes: J.Garcia i E. Constantino