

PROGRAMA D'AMPLIACIÓ DE QUÍMICA FÍSICA

(Dr. X. Doménech)

TERMODINÀMICA ESTADÍSTICA

1. *Introducció.*

- Entropia i desordre. Relació de Boltzmann.
- Complexions.
- Partícules discernibles o indiscernibles.

2. *Estadístiques Clàssica i Quàntica.*

- Model de Bose-Einstein.
- Model de Fermi-Dirac.
- Model clàssic de Maxwell-Boltzmann.
- Comparació entre les tres estadístiques.

3. *Funció de Partició.*

- Càlcul quàntic de funcions de partició.
- Funció de partició clàssica.
- Càlcul clàssic de funcions de partició.
- Comparació entre ambdós mètodes de càlcul.

4. *Algunes aplicacions*

- Càlcul de variables termodinàmiques.
- Equació d'estat dels gasos ideals.
- Capacitat calorífica d'un sòlid monoatòmic. Model d'Einstein. Model de Debye.
- Constants d'equilibri.

5. *Sistemes de partícules dependents*

- Col·lectius.
- Distribució més probable.
- Funció de partició. Integral de configuració.

FISICOQUÍMICA DE LES DISSOLUCIONS

1. *Interacció ió-dissolvent.*

- Model de Born.
- Model estructural.
- Interaccions del dissolvent amb metalls de transició.
- Solvatació.
- Efecte salí. "Salting in" i "Salting out".

2. *Interacció ió-íó.*

- Teoria de Debye-Hückel.
- Potencial químic. Coeficient d'activitat.
- Llei límit de Debye-Hückel.
- Paràmetre a de màxim apropament.

3. *Transport (I). Difusió.*

- Transport dels ions en dissolució.
- Difusió. 1^{ra} llei de Fick.
- Potencial electroquímic. Migració.
- Equacions de Stokes-Einstein i de Nernst-Einstein.
- 2^{na} llei de Fick. Ressolució.

4. *Transport (II). Conductivitat*

- Conductivitat específica i equivalent.
- Variació de la conductivitat equivalent amb la concentració.
Equació de Kohlrausch.
- Efectes de relaxació i electroforètic. Equació d'Onsager.
- Constant d'associació. Determinació a partir del mètode de Fuoss.
- Números de transport.

ELECTROQUÍMICA.

1. *Termodinàmica de l'equilibri electroquímic.*

- Diferència de potencial entre dues fases.

- Força electromotriu d'una pila.
- Potencials d'elèctrode. Escala de potencials.
- Potencial d'unió líquida.
- Tipus d'elèctrodes.

2. Doble capa electroquímica.

- Introducció.
- Termodinàmica de la doble capa.
- Capacitat de la doble capa.
- Model d'Helmholtz.
- Model de Gouy-Chapman.
- Altres models.

3. Cinètica electroquímica (I).

- Sobretensió de transferència. Factor de simetria.
- Corbes I-E. Equació de Tafel.
- Processos en varies etapes.

4. Cinètica electroquímica (II).

- Sobretensió de difusió. Capa de difusió.
- Processos estacionaris. Corbes I-E.
- Processos no estacionaris. Variació del potencial amb el temps.
- Sobretensió de cristallització.

5. Mètodes electroquímics experimentals.

- Mètodes estacionaris.
- Mètodes no estacionaris.
- Mètodes periòdics.
- Determinació de mecanismes de reacció.