

Dra. Baró i Dr. Bordas

# Mecànica i Termodinàmica en Química

## PROGRAMA

### I - FONAMENTS DE LA TERMODINÀMICA

- 1 - Conceptes fonamentals.- Sistemes termodinàmics.- Descripció macroscòpica i microscòpica d'un sistema.- Estat d'un sistema.- Variables d'estat. Variables intensives i extensives.- Interacció i processos.
- 2 - Príncipi zero.- Equilibri termodinàmic.- Príncipi zero de la Termodinàmica.- Temperatura.- Escalas termomètriques.- Termòmetre de gas. Escala de temperatures del gas ideal.- Altres termòmetres.- Escala Internacional de temperatura.
- 3 - Primer príncipi de la Termodinàmica.- Antecedents.- Treball.- Energia interna.- Formulació de la primera llei.- Calor.- Interpretació molecular.
- 4 - Segon príncipi de la Termodinàmica.- Necessitat del segon principi.- Enunciats clàssics del segon principi.- Processos i cicles reversibles i irreversibles.- Calor i temperatura. Teorema de Carnot.- Temperatura termodinàmica.- Desigualtat de Clausius.- Entropia.- Entropia en processos i cicles reversibles i irreversibles.- Energia i entropia.- Entropia i probabilitat.
- 5 - Estructura formal de la Termodinàmica.- Equacions fonamentals en les representacions de l'energia i de l'entropia.- Equació de Euler.- Equació de Gibbs-Duhem.- Generalització en sistemes oberts. Potencial químic.
- 6 - Equacions d'estat.- Equacions d'estat energètica i termiques d'un sistema.- Relacions entre les equacions energètica i termiques.- Propietats termiques d'un sistema. Coeficients tèrmics.- Propietats energètiques d'un sistema. Capacitats i coeficients calorífics.- Relacions.- Equació TdS.
- 7 - Equilibri termodinàmic.- Condicions generals d'equilibri d'un sistema termodinàmic.- Condicions d'equilibri d'un sistema aïllat.- Equilibri tèrmic, mecànic i material.
- 8 - Potencials termodinàmics.- La energia interna com a potencial termodinàmic.- Transformació de Legendre.- Funció de Helmholtz.- Funció de Gibbs.- Entalpia.- Funcions de Massieu.- Relacions de Maxwell.- Equacions de Gibbs-Helmholtz.
- 9 - Transicions de fase.- Introducció.- Classificació.- Transicions de primer ordre. Curvas d'equilibri. Equacions de Clapeyron i Clausius.- Regles de Gouberg i Trouton.- Transicions de fase d'ordre superior.- Sistemes heterogenis multicomponents. Regle de les fases de Gibbs.
- 10 - Tercer príncipi de la Termodinàmica.- Diferents enunciats.- Conseqüències.- Càlcul d'entropies absolutes. Constant químic.

## II - ALGUNES APLICACIONS DE LA TERMODINÀMICA

- 1 - Propietats molars parcials.- Relacions termodinàmiques entre propietats molars parcials.- Propietats molars aparents.- Determinació de les magnituds molars parcials.
- 2 - Gasos perfectes.- Definició de gas perfecte.- Equació tèrmica d'estat.- Energia interna i calorès específiques.- Entropia del gas perfecte.- Mescles de gasos perfectes. Llei de Dalton.- Entropia de mescla.
- 3 - Gasos reals.- Equacions tèrmiques d'estat.- Punt crític.- Equació d'estat reduïda. Llei dels estats corresponents.- Factor de compressibilitat.
- 4 - Energia interna dels gasos reals. Efecte Joule.- Entalpia de gasos reals. Efecte Joule-Kelvin.- Energètica dels processos de flux.
- 5 - Potencial de Gibbs de gasos reals. Fugacitat.- Dependència de la fugacitat amb la pressió i amb la temperatura.- Determinació de fugacitats.
- 6 - Mescles de gasos reals.- Fugacitat d'un component en una mescla.- Determinació de la fugacitat en una mescla de gasos. Regla de Lewis i Randall.
- 7 - Dissolucions.- Classificació termodinàmica.- Dissolucions ideals. Definició.- Propietats de les dissolucions ideals. Llei de Raoult. Funcions de mescla.- Aplicació de les dissolucions ideals a l'estudi de l'equilibri líquid-vapor i sòlid-líquid, mescles eutèctiques.
- 8 - Dissolucions diluïdes. Definició.- Propietats de les dissolucions diluïdes. Llei d'Henry, llei de Raoult i llei del repartiment de Nerst.- Propietats col·ligatives.
- 9 - Dissolucions reals. Definició.- Activitat. Coeficient d'activitat. Estats de referència.- Relació entre els coeficients d'activitat i les lleis de Raoult i Nerst.- Funcions d'excés.- Determinació dels coeficients d'activitat.
- 10 - Calors de dissolució i dilució.- Calor integral de dissolució.- Calor integral de dilució.- Calor diferencial de dissolució.
- 11 - Reaccions químiques.- Energètica de les reaccions químiques.- Calor de reacció.- Llei de Hess.- Entalpies de formació a l'estat de referència.- Variació de l'entalpia de reacció amb la temperatura i la pressió.
- 12 - Equilibri químic.- Grau d'avanc i potencial de reacció.- Condició general de l'equilibri químic.- Constant d'equilibri.
- 13 - Variació de la constant d'equilibri amb la temperatura.- El principi de Le Chatelier.- Aplicacions pràctiques de la constant d'equilibri.- Avaluació de la constant d'equilibri.

### III - MECÀNICA

- 1 - Lleis fonamentals de la Mecànica (Newton).- Equacions del moviment.- Impuls d'una força i moment lineal.
- 2 - Moviment del centre de massa.- Moment dinàmic i moment angular.- Energia.- Camps centrals.- Moviment planetari.
- 3 - Sistemes de referència.- Derivada d'un vector respecte al temps.- Equacions del moviment relatiu.- Sistemes inercials: Transformació de Galileu.
- 4 - Tensors cartesians.- Transformació de coordenades rectangulars: matriu ortogonal.- Definició d'un tensor.- El tensor com a operador.- Tensors simètrics: valors i vectors propis.- Invariants d'un tensor.
- 5 - Sistema de forces aplicades a un sòlid.- Geometria de masses: centre de massa i tensor d'inèrcia.- Cinemàtica del sòlid rígid.- Magnituds mecàniques fonamentals.
- 6 - Equacions del moviment d'un sòlid rígid.- Equacions d'Euler.- Casos particulars.
- 7 - Nocions de dinàmica analítica.- Lligadures.- Principi dels treballs virtuals.- Principi de D'Alambert: equacions de Lagrange de 1a. espècie.
- 8 - Coordenades generalitzades: Equacions de Lagrange de 2a. espècie.- Equacions canòniques de Hamilton.
- 9 - Oscil.lacions.- Equació reduïda del moviment oscil.latori; tipus de solució.- Oscil.lacions forçades.- Ressonància.