

TERMODINAMICA i CINETICA QUIMICA

Termoquímica

1. Introducció.

L'estat gasós: gasos ideals. Mescles. L'aire: composició i propietats. Gasos reals. Sistemes termodinàmics. L'equilibri termodinàmic. Transferència de calor i treball. Primer principi de la Termodinàmica.

2. Calor de reacció.

L'entalpia. Entalpia estàndart. Entalpia de reacció. Llei de Hess. Entalpia de formació. Energia d'enllaç. Capacitat calorífica. Dependència de l'entalpia de reacció amb la temperatura.

Equilibri Químic

3. Reversibilitat i espontaneïtat.

L'entropia. Segon principi de la Termodinàmica. Entropies absolutes. Tercer principi de la Termodinàmica. Canvis d'entropia d'una reacció química.

4. Funció de Gibbs. Criteri d'espontaneïtat

La funció de Gibbs. La funció de Gibbs estàndart de formació. Càlcul de la funció de Gibbs estàndart d'una reacció química. Funció de Gibbs i equilibri.

5. L'equilibri.

Potencial químic. Pressió de vapor. L'equació de Clapeyron: volatilització de contaminants. Dissolucions. Equilibri líquid-vapor: Llei de Raoult. Llei d'Henry: solubilitat de gasos atmosfèrics en el medi aquàtic. Propietats coligatives.

6. 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.

Cinètica Químic

7. Velocitat d'una reacció.

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

8. Mecanismes de reacció.

Reaccions elementals. Molecularitat. Processos en vàries 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.

9. Processos químics atmosfèrics.

Reaccions fotoquímiques: fluorescència, fosforescència. Processos radicalaris: radicals en l'atmosfera. Catàlisis 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.
- B.M. Mahan, "Química Curso Universitario" Addison-Wesley Iberoamericana. 1986.
- X. Domènech, "Química Atmosfèrica". Ed. Miraguano. Madrid. 1991.