

## QUIMICA FISICA II

### **1.- Introducció a la Cinètica Química**

Velocitat de reacció.- Equació de velocitat.- Mètodes experimentals.- Determinació de l'ordre de reacció.- Integració de les equacions de velocitat.- Mètode diferencial de Van't Hoff.- Dependència de la constant de velocitat amb la temperatura.- Equació d'Arrhenius.

### **2.- Reaccions Complexes**

Mecanismes de reacció.- Reaccions reversibles.- Reaccions consecutives.- Reaccions paral·leles.- Resolució analítica exacta per reaccions complexes de primer ordre.- Aproximació de l'estat estacionari.- Aproximació de l'equilibri.- Mètode del pseudoprimer ordre.

### **3.- Reaccions en Cadena**

Reaccions en cadena lineal.- Reacció de formació del bromur d'hidrogen.- Descomposició tèrmica d'hidrocarburs.- Reaccions de polimerització.- Reaccions en cadena ramificada.- Reacció  $H_2 + 1/2 O_2$ .- Límits d'explosió.

### **4.- Justificació Teòrica de la Velocitat d'una Reacció Química**

Introducció.- Superfícies d'energia potencial.- Teoria de l'estat de transició.- Formulació termodinàmica.- Efectes cinètics isotòpics.

### **5.- Reaccions en Dissolució**

Introducció.- Difusió.- Solució de l'equació de difusió.- Reaccions limitades per difusió.- Reaccions lentes.- Relacions lineals d'energia lliure.

### **6.- Catalisi**

Introducció.- Tipus de catalisi.- Catalisi àcid-base específica i general.- Catalisi enzimàtica.

### **7.- Reaccions Unimoleculars**

Introducció.- Mecanisme de Lindemann.- Límits a altes i baixes pressions. Tractament de Hinselwood.

### **8.- Cinètica Electroquímica**

Processos en l'electrode.- Velocitat de transferència electrònica.- Sobretensió. Densitat de corrent.- Equació de Butler-Volmer.- Difusió i transferència electrònica.- Aplicacions.

## **9.- Fotoquímica**

Lleis de la fotoquímica.- Diagrames de Jablonski.- Processos de desactivació fotofísics i fotoquímics primaris. Equació de Stern-Volmer.- Processos fotoquímics secundaris.

## **BIBLIOGRAFIA**

- R.S. Berry, S.A. Rice i J.Ross. "Physical Chemistry" (part 3). J.Wiley, 1980.
- M. Díaz Peña i A. Roig Muntaner. "Química Física", Alhambra, 1975.
- J.W. Moore i R.G. Pearson. "Kinetics and Mechanism", J.Wiley, 1981 (3<sup>a</sup> edición).
- R.E. Weston i H.A. Schwartz. "Cinética Química", Alhambra, 1976.