

TERMODINAMICA i CINETICA QUIMICA

1. Introducció.

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

Termoquímica

2. Introducció.

Sistemes termodinàmics. Equacions d'estat. Gasos ideals. Mescles. L'aire: composició i propietats. Gasos reals. Calor i treball. Processos reversibles i irreversibles. Energia interna. Primer principi de la Termodinàmica. Entalpia. Càlculs amb gasos ideals.

3. Calor de reacció.

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

Equilibri Químic

4. Reversibilitat i espontaneïtat.

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

5. Criteris d'espontaneïta i d'equilibri.

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. Sistemes de composició variable. Potencial químic. Condició d'equilibri. Potencial químic de gasos ideals i reals.

6. L'equilibri material.

Regla de les fases. Pressió de vapor. L'equació de Clapeyron: volatilització de contaminants. Sistemes de dos components. Dissolucions ideals. Llei de Raoult. Llei d'Henry: solubilitat de gasos atmosfèrics en el medi aquàtic. Dissolucions reals. Propietats col·ligatives. Equilibri de fases en sistemes de més d'un component.

7. 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 Química

8. 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.

9. Mecanismes de reacció.

Reaccions elementals. Molecularitat. Processos en diverses 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.

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.
- B.M. Mahan, "Química Curso Universitario" Addison-Wesley Iberoamericana. 1986.
- X. Domènech, "Química Atmosfèrica". Ed. Miraguano. Madrid. 1991.