

QUÍMICA FÍSICA

1.- Principis de la Termodinàmica

Sistemes termodinàmics.- Gasos ideals.- Calor i treball.- 1^{er} Principi de la Termodinàmica.- Entalpia.- Entalpies de reaccions químiques.- Llei de Hess.- Llei de Kirchhoff.- Entalpies d'enllaç.- Entropia.- 2^{on} Principi de la Termodinàmica.- 3^{er} Principi de la Termodinàmica.

2.- Potencials Termodinàmics

Funcions de Helmholtz i de Gibbs.- Equacions termodinàmiques d'estat.- Dependència de la funció de Gibbs respecte a la pressió i la temperatura.- Equació de Gibbs-Helmholtz.- Criteris d'espontaneïtat i d'equilibri en sistemes tancats.- Treball útil i energia de Gibbs. - Energia de Gibbs de reacció.

3.- Sistemes de composició variable. Potencial químic

Propietats molars parcials.- Determinació de propietats molars parcials.- Potencial químic.- Criteri d'espontaneïtat i equilibri.- Potencial químic de gasos ideals i reals.- Fugacitat. Variació amb la pressió i la temperatura.- Termodinàmica de la mescla de gasos.

4.- Equilibri de fases en sistemes d'un component

Fases i components.- Regla de les fases.- Diagrama de fases en sistemes d'un component.- Equació de Clapeyron.

5.- Dissolucions

Llei de Raoult. Concepte de dissolució ideal.- Potencial químic d'una dissolució ideal.- Llei de Henry.- Llei de distribució de Nernst.- Propietats col.ligatives: ebulloscòpia, crioscòpia i pressió osmòtica.- Dissolucions reals. Concepte d'activitat.- Coeficient d'activitat. Elecció dels estats de referència.

6.- Equilibri de fases en sistemes de més d'un component

Sistemes de dos components.- Equilibri líquid-líquid. - Equilibri líquid-sòlid.- Equilibri líquid-vapor.- Destil.lació.

7.- Equilibri químic

Condicció d'equilibri químic.- Equilibri químic en sistemes gasosos homogenis.- Constant d'equilibri.- Dependència de la constant d'equilibri respecte a la pressió i la temperatura.- Equilibris heterogenis.- Equilibri químic en dissolució.- Equilibris electroquímics.- Coeficient d'activitat iònica mitjà.- Diferència de potencial entre fases.- Electrodes i piles.- Potencial standard.- Equació de Nernst.

8.- Cinètica Formal

Velocitat de reacció.- Equació de velocitat.- Molecularitat i ordre.- Integració de les equacions de velocitat.- Mètode diferencial de Van't Hoff.- Reaccions complexes: reversibles, consecutives i paral·leles.- Aproximacions de l'estat estacionari i de l'equilibri.- Reaccions en cadena.- Resolució exacta de reaccions complexes. Mètodes analítics i numèrics.

9.- Cinètica Molecular. Teoria de l'estat de transició

Efecte de la temperatura sobre la velocitat de reacció.- Equació d'Arrhenius.- Superfícies d'energia potencial.- Teoria de l'estat de transició.- Formulació termodinàmica.- Entalpia i entropia d'activació.- Efectes cinètics isotòpics.

10.- Química de superfícies

Tensió superficial. Equació de Young.- Termodinàmica de superfícies.- Adsorció de gasos: quimisorció i fisisorció.- Isotermes d'adsorció.- Interfase electrificada.

11.- Catàlisi

Tipus de catàlisi. Catàlisi àcid-base específica i general.- Catàlisi enzimàtica. Equació de Michaelis-Menten.- Catàlisi heterogènia.

BIBLIOGRAFIA

- * P.W. Atkins, Fisicoquímica, Addison Wesley.
- * I.N. Levine, Fisicoquímica, Mc Graw Hill, 1991.
- * W.J. Moore, Química Física, Longman, 1974.
- * E. Brillas; R.M. Bastida; F. Centelles, X. Domènech, Fonaments de termodinàmica, Electroquímica i cinètica, Barcanova, Barcelona, 1992.
- * M. Díaz-Peña i A. Roig Muntaner, Química Física, Alhambra, 1975.

OBJECTIUS DE L'ASSIGNATURA

L'objectiu global de l'assignatura de Química Física és el de suministrar a l'alumne les eines bàsiques de la metodologia pròpia de la Química Física per tal que, en cursos posteriors, pugui aplicar-les a problemes específics. En particular el programa es pot dividir en tres grans apartats:

- Termodinàmica Química i les seves aplicacions a l'equilibri químic i electroquímic.
- Cinètica química
- Química de superfícies.

SISTEMA D'AVUACIO

Exàmen escrit al final del semestre