

TERMODINÀMICA I CINÈTICA QUÍMICA  
Graduat Superior en Biotecnologia

**1. Els principis de la termodinàmica.**

Introducció. Calor i treball. Processos reversibles i irreversibles. Primer principi de la termodinàmica. Energia interna. Entalpia.

**2. Termoquímica.**

Calor de reacció. Llei de Hess. Entalpia estàndard de formació. Dependència de l'entalpia de reacció amb la temperatura: equació de Kirchoff. Energies d'enllaç.

**3. Espontaneïtat i equilibri.**

Segon principi de la termodinàmica. Entropia. Tercer principi. Entropies absolutes. Entropies de reacció. Potencials termodinàmics: funcions de Helmholtz i de Gibbs. Criteris d'espontaneïtat i d'equilibri. Variació de la funció de Gibbs amb la pressió i amb la temperatura.

**4. Sistemes de composició variable.**

Propietats molars parcials. Potencial químic. Criteris d'espontaneïtat i d'equilibri. Potencial químic de gasos. Termodinàmica de mescles en gasos ideals.

**5. Equilibri de canvi de fase.**

Regla de les fases. Sistemes d'un component. Equacions de Clapeyron i de Clausius-Clapeyron. Diagrames de fases. Dissolucions ideals. Llei de Raoult. Dissolucions diluïdes. Llei de Henry. Propietats col·ligatives: crioscòpia, ebulloscòpia, pressió osmòtica. Solubilitat de gasos en líquids. Dissolucions reals. Activitat. Destil·lació. Miscibilitat.

**6. Equilibri químic.**

Condicció general d'equilibri químic. Energia de Gibbs estàndard d'una reacció. Constants d'equilibri en sistemes gasosos. Influència de la temperatura: equació de van't Hoff. Principi de Le Chatelier. Equilibri en sistemes heterogenis. Equilibri en sistemes electroquímics, equació de Nernst.

## 7. Introducció a la cinètica química.

Velocitat de reacció. Equacions de velocitat diferencials i integrades. Ordre i molecularitat.

Temps de semireacció. - Determinació experimental de l'ordre d'una reacció.

## 8. Reaccions complexes

Cinètica i mecanisme d'una reacció química. Etapa controlant. Reaccions reversibles, consecutives i paral·leles. Aproximacions de l'estat estacionari i de l'etapa determinant de la velocitat. Reaccions en cadena

## 9. Cinètica molecular

Variació de la velocitat de reacció amb la temperatura. Equació d'Arrhenius. Teoria de col·lisions. Teoria de l'estat de transició. Aspectes termodinàmics i cinètics d'una reacció química. Control cinètic i control termodinàmic.

## 10. Catàlisi

Concepte de catàlisi. Catàlisi homogènia. Catàlisi àcid-base. Catàlisi heterogènia. Isotermes d'adsorció. Catàlisi enzimàtica. Equació de Michaelis- Menten. Inhibició.

## BIBLIOGRAFIA

- E. Brillas, R.M. Bastida, F. Centelles, X. Domènech, *Fonaments de Termodinàmica, Electroquímica i Cinètica*, Barcanova, Barcelona, 1992.
- Price, G. *Thermodynamics of Chemical Processes* (Oxford Chemistry Primers 56), Oxford, University Press, 1998
- Mahan, B. H. *Termodinàmica Química Elemental*, Reverté, Barcelona, 1976.W.
- Anderson, G. M. *Thermodynamics of Natural Systems*, John Wiley, Nueva York, 1995
- Logan, S. R. *Fundamentals of Chemical Kinetics*. Longman. Londres. 1996.
- Logan, S. R. *Fundamentos de Cinética Química*, Addison Wesley Iberoamericana, Madrid, 1999..
- Cox, B. G. *Modern Liquid Phase Kinetics*. (Oxford Chemistry Primers 21), Oxford University Press, Oxford, 1994.
- Sanz Pedrero P., *Fisicoquímica para Farmacia y Biología*. Ed. Científico-Técnica. Barcelona. 1992.
- Atkins, *Fisicoquímica*, 5<sup>a</sup> ed., Addison-Wesley, 1994.
- I.N. Levine, *Fisicoquímica*, 4<sup>a</sup> ed., Vol. 1, Mc Graw-Hill, 1996.

## PROFESSORS

**Teoria:** José A. Ayllón, despatx C7/129

**Problemes:** Oriol Vendrell , despatx C7/153 i José A. Ayllón