

Llicenciatura de Bioquímica. **Ampliació de Química I**

1ª part. Termodinàmica.

Lliçó 1. Primer Principi.

Sistemes termodinàmics. Gasos ideals. Gasos reals. Processos reversibles i irreversibles. Primer principi de la termodinàmica. Calor i treball. Energia interna. Entalpia.

Lliçó 2. Termoquímica

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

Lliçó 3. Segon Principi.

Segon principi de la termodinàmica. Entropia. Tercer principi: entropies absolutes. Interpretació molecular de l'entropia. Increment d'entropia de reacció.

Lliçó 4. Criteris d'espontaneïtat i d'equilibri.

Potencials termodinàmics: funcions de Gibbs i de Helmholtz. Variació de la funció de Gibbs amb la pressió i amb la temperatura. Variació d'energia de Gibbs d'una reacció. Potencial químic. Activitat.

Lliçó 5. L'equilibri de fases.

Condicció d'equilibri. 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.

Lliçó 6. Equilibri químic.

Condicció general d'equilibri químic. Variació d'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.

Lliçó 7. Equilibri iònic.

Tipus d'electròlits. Teoria d' Arrhenius. Conductivitat. Grau de dissociació. Coeficient d'activitat.

Lliçó 8. Equilibri àcid-base.

Àcids i bases. Equilibris d'ionització. Efecte del pH en el grau d'ionització. Hidròlisi. Dissolucions amortidores.

2ª part. Cinètica química

Lliçó 9. Lleis fonamentals de la cinètica química.

Velocitat de reacció. Ordre de reacció. Equacions de velocitat diferencials i integrades. Determinació experimental de l'ordre d'una reacció.

Lliçó 10. Mecanismes de reacció.

Reaccions reversibles, consecutives i paral·leles. Determinació del mecanisme d'una reacció: aproximació de l'estat estacionari i aproximació de l'etapa determinant de velocitat. Dependència de la constant de velocitat amb la temperatura. Teoria d' Arrhenius. Energia d'activació. Reaccions en cadena

Lliçó 11. Catàlisi.

Concepte de catàlisi. Aspectes termodinàmics i cinètics d'una reacció química. Control cinètic i control termodinàmic. 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. *Termodinámica 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*, 5ª ed., Addison-Wesley, 1994.
- I.N. Levine, *Fisicoquímica*, 4ª ed., Vol. 1, Mc Graw-Hill, 1996.

Professors

- Teoria. José A. Ayllón
Despatx C7-126. Atenció als alumnes: horari a convenir.
- Problemes. David Gutiérrez, C7.118.
- Pràctiques. Neus Vilà i Adrià Gil.