

## **TERMODINÀMICA I CINÈTICA QUÍMICA**

1. **Introducció a la Termodinàmica.** Introducció històrica. Termodinàmica i energia. Sistemes termodinàmics. Propietats termodinàmiques. Estats i processos. Gasos ideals i reals. Pressió i temperatura. Principi zero de la Termodinàmica. Lleis dels gasos ideals. Gasos reals.
2. **1r Principi de la Termodinàmica.** Calor i Treball. Energia interna i la 1a llei. Processos reversibles i irreversibles. Capacitat calorífica. Entalpia. Processos adiabàtics. Termoquímica. Llei de Hess. Dependència de les entalpies de reacció amb la temperatura: Llei de Kirchoff. Entalpies d'enllaç. Expressió diferencial de l'energia interna. L'experiment de Joule. Canvis d'energia interna a pressió constant. Dependència de l'entalpia amb la temperatura. L'efecte Joule-Thomson.
3. **2n principi de la Termodinàmica.** Entropia. La desigualtat de Claussius. Variació de l'entropia en alguns processos. Tercer principi de la Termodinàmica. Entropies de reacció.
4. **Condicions d'equilibri en sistemes tancats.** Funcions de Helmholtz i de Gibbs. Criteris d'espontaneïtat i d'equilibri en sistemes tancats. Propietats de l'energia de Helmholtz. Propietats de l'energia de Gibbs. Energies de Gibbs estàndard de reacció. Equació fonamental de la termodinàmica. Relacions de Maxwell. Dependència de la funció de Gibbs respecte a la pressió i la temperatura: Equació de Gibbs-Helmholtz.
5. **Sistemes de composició variable.** Potencial químic. Propietats molars parcials. Potencial químic de gasos reals: fugacitat. Termodinàmica de mescles en gasos ideals.
6. **Equilibri de fases en sistemes d'un component.** Fases i components. Regla de les fases. Diagrama de fases en sistemes d'un component. Equacions de Clapeyron i de Clausius-Clapeyron.
7. **Dissolucions ideals.** Concepte de dissolució ideal. Llei de Raoult. Potencial químic d'una dissolució ideal. Termodinàmica de mescles en dissolucions ideals.
8. **Dissolucions no ideals.** Introducció. Dissolució diluïda ideal. Llei de Henry. Propietats col·ligatives: ebulloscòpia, crioscòpia i pressió osmòtica. Dissolucions reals. Concepte d'activitat. Elecció dels estats de referència.
9. **Equilibri de fases en sistemes de més d'un component.** Sistemes de dos components. Equilibri líquid-vapor. Destil·lació. Equilibri líquid-líquid. Equilibri líquid-sòlid. Sistemes de tres components.
10. **Equilibri químic.** Condició d'equilibri químic. Energia de Gibbs de reacció. Equilibri químic en sistemes gasosos homogenis. Constant d'un equilibri químic general. Principi de Le Chatelier. Dependència de la constant d'equilibri respecte a la pressió i temperatura. Equació de van't Hoff.
11. **Velocitat d'una reacció.**  
Cinètica vs. termodinàmica. Definició matemàtica de velocitat de reacció. Equació diferencial de velocitat. Etapes elementals, molecularitat i ordre de reacció. Equacions integrades de velocitat. Mètode diferencial d'estudi de les cinètiques. Dependència de la constant de velocitat amb la temperatura.
12. **Mecanismes de reacció.**  
Constants de velocitat i constants d'equilibri. Reaccions reversibles. Reaccions consecutives. Reaccions competitives. Reaccions en cadena. Aproximació de l'etapa d'equilibri. Aproximació de l'estat estacionari.
13. **Catàlisi**  
Mecanisme general de la catàlisi. Catàlisi homogènia. Catàlisi àcid-base. Catàlisi enzimàtica. Catàlisi heterogènia.

## Bibliografia recomanada

- E. Brillas, R.M. Bastida, F. Centellas i X. Domènech, *Fonaments de Termodinàmica, Electroquímica i Cinètica*. Ed. Barcanova. Barcelona. 1992.
- I. N. Levine, *Fisicoquímica*, Volum I, McGraw Hill, 1996.
- P.W. Atkins, *Physical Chemistry*, Oxford University Press, 1998.
- O. Levenspiel, *Understanding Engineering Thermo*, Prentice Hall, 1996.
- Y.A. Çengel, M.A. Boles, *Thermodynamics, an Engineering Approach*, McGraw Hill, 1989.

Professor: José Peral

Despatx: C7 / 112

Horari de visites: dilluns i dimecres de 17:00 a 18:00