

20612 QUÍMICA FÍSICA

(Termodinàmica i Cinètica Química)

Curs 2005/06

1. Conceptes Fonamentals

Objectiu de la Termodinàmica. Sistema, Entorn i Univers, Estat d'un Sistema. Variables Termodinàmiques. Transformacions d'un Sistema. Transferència entre el Sistema i l'Entorn. Energia, Calor i Treball. Gasos Ideals. Gasos Reals.

2. Principis de la Termodinàmica i Funcions d'Estat: U, H, S, A, G

Principi Zero. Primer Principi: Conservació de l'Energia, U. Capacitat Calorífica i H. Segon Principi: Evolució dels Sistemes, S. Tercer Principi. Funcions d'Estat: A, G. Expressions de les Diferencials de les Funcions d'Estat. Condició d'Evolució i Equilibri.

3. Potencial Químic: μ

Definició. Relacions Entre el Potencial Químic i les Funcions d'Estat. Magnitud Molar Parcial: Definició, Expressió Diferencial. Variació del μ amb la Pressió i la Temperatura. Expressions de μ . Activitat del Solut. Estats Estàndard, Magnituds Estàndard.

4. Magnituds d'una Reacció Química

Definició. Magnituds Estàndard d'una Reacció Química: Significat i Relacions Fonamentals. Convencions Relatives a les Magnituds de Reacció Química: Dades de les Taules en Termodinàmica. Càlcul de les Magnituds Standard de Reacció, $\Delta_r X^\circ$. Variació de $\Delta_r X^\circ(T)$ amb la Temperatura. Calors de Reacció.

5. Evolució i Equilibri

Condicions de l'Evolució i de l'Equilibri. Expressió de $\Delta_r G$ i de la Constant d'Equilibri en una Reacció, K° . Definició de la Constant d'Equilibri $K^\circ(T)$. Equilibri: Relació de Guldberg i Waage. Exemples: Significat i Utilitat de $\Delta_r G$ i $\Delta_r G^\circ$. Efecte de la Temperatura en K° : Relació de Van't Hoff. Pertorbació Infinitesimal d'un Paràmetre: Exemples. Pertorbació Finita: Sentit d'Evolució.

6. Equilibris de Canvi de Fase

Graus de Llibertat d'un Sistema en Equilibri: Teorema de Gibbs. Estats de la Matèria: Canvis d'Estat. Canvis d'estat d'un Cos Pur: Calor Latent de Canvi d'Estat. Estudi d'Equilibris Binaris Líquid-Vapor. Diagrames Binaris Líquid-Vapor Isotermes i Isòbars. Equilibris Binaris Isotermes: Llei de Raoult i Llei de Henry. Determinació dels Coeficients d'Activitat. Aplicació a la Destil·lació. Diagrames d'Equilibri Binari Sòlid-Líquid. Propietats Coligatives.

7. Cinètica Formal

Velocitat de Reacció. Molecularitat i Ordre. Equació de Velocitat. Mètodes Experimentals. Mètode d'Integració i Mètode Diferencial. Reaccions Complexes: Reversibles, Consecutives i Paral·leles. Aproximacions de l'Estat Estacionari i de l'Equilibri. Reaccions en Cadena. Catàlisi.

8. Cinètica Molecular

Dependència de la Constant de Velocitat amb la Temperatura: Equació d'Arrhenius. Teoria de Col·lisions. Teoria de l'Estat de Transició. Formulació Termodinàmica.

9. Reaccions en Dissolució

Efecte del Dissolvent en les Constant de Velocitat. Difusió. Reaccions Controlades per Difusió. Reaccions Iòniques: Influència de la Força Iònica. Aplicació de la Teoria de l'Estat de Transició als Efectes del Dissolvent.

Bibliografia

- P.W. Atkins, *Physical Chemistry*, Oxford University Press, (7th Ed.) 2002.
- I.N. Levine, *Fisicoquímica*, McGraw Hill, 2004.
- D. Eisenberg, D. Crothers, *Physical Chemistry with applications to the life Sciences*, Benjamin/Cummings, 1979.
- J.M. Seddon, J.D. Gale, *Thermodynamics and Statistical Mechanics*, Royal Society of Chemistry, 2001.
- J.A. Rodríguez Renuncio, J.J. Ruiz Sánchez, J.S Urieta Navarro, *Termodinámica Química*, Ed. Síntesis, 1999.
- E.Brillas, R.M. Bastida, F. Centellas, X. Doménech, *Fonaments de Termodinámica, Electroquímica i Cinética*, Ed. Barcanova, 1992.
- B.G. Cox, *Modern Liquid Phase Kinetics*, Zeneca, 1994.
- S. Logan, *Fundamentos de la Cinética Química*, Addison-Wesley, 2000.