

QUÍMICA FÍSICA I

1. **Introducció.** Sistemes termodinàmics. Equilibri. Propietats termodinàmiques. Estats i processos. 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 1^a llei. Capacitat calorífica. Entalpia. Energia interna i Entalpia d'un gas ideal. L'efecte Joule. Càlculs amb gasos ideals. Processos adiabàtics. Termoquímica. Llei de Hess. Dependència de les entalpies de reacció amb la temperatura: Llei de Kirchhoff. Entalpies d'enllaç.
3. **2n principi de la Termodinàmica.** Processos reversibles i irreversibles. Processos espontanis Màquines tèrmiques: el cicle de Carnot. La desigualtat de Clausius. Entropia. Variació de l'entropia en alguns processos. Tercer principi de la Termodinàmica. Entropies de reacció.
4. **Condicions d'equilibri en sistemes tancats.** Energies de Helmholtz i de Gibbs. Criteris d'espontaneïtat i d'equilibri en sistemes tancats. Equacions de Gibbs. Relacions de Maxwell. Dependència de la funció de Gibbs respecte a la pressió i la temperatura: Equació de Gibbs-Helmholtz. Energies de Gibbs estàndard de reacció.
5. **Sistemes de composició variable.** Potencial químic. Potencial químic d'un gas ideal. Potencial químic de gasos reals: fugacitat. Sistemes multifàsics.
6. **Equilibri de fases en sistemes d'un component.** Condició d'equilibri de fases. 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.** Propietats molars parcials. 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. Constant de repartiment. 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.
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. **Equilibri electroquímic.** Sistemes electroquímics. Potencial electroquímic. Elèctrodes reversibles. Piles. Força electromotriu. Potencial estàndard. Equació de Nernst. Aplicacions.

Bibliografia recomanada

- E. Brillas, R.M. Bastida, F. Centellas i X. Domènech, *Conceptes de Termodinàmica Química i Cinètica*. Ed. Universitat de Barcelona. Barcelona. 2004.
- I. N. Levine, *Fisicoquímica*, Volum I, McGraw Hill, 2004.
- P.W. Atkins, *Physical Chemistry*, Oxford University Press, 1998.