

PROGRAMA DE TERMODINÀMICA I CINÈTICA QUÍMICA

Cinètica Química

1. Conceptes Fonamentals de Cinètica Química

Aspectes termodinàmics i cinètics d'una reacció química. Definició de velocitat de reacció. Equació diferencial de velocitat. Ordre i molecularitat. Constant de velocitat. Equacions integrades de velocitat. Establiment de la llei de velocitat. Dependència de la constant de velocitat amb la temperatura : equació d'Arrhenius.

2. Mecanismes de Reacció

Reacció elemental. Mecanisme de reacció. Alguns mecanismes de primer ordre : reaccions reversibles, consecutives i competitives. Mètodes aproximats : aproximacions de l'estat estacionari i de l'equilibri. Reaccions en cadena.

3. Catàlisi

Mecanisme general de la catàlisi química. Catàlisi homogènia. Catàlisi enzimàtica. Catàlisi heterogènia.

Termodinàmica

4. Introducció a la Termodinàmica

Termodinàmica i energia. Sistemes i propietats termodinàmiques. Principi zero de la termodinàmica. Equacions d'estat. El gas ideal. Mescles de gasos ideals. Gasos reals.

5. Primer Principi de la Termodinàmica

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

6. Segon Principi de la Termodinàmica

Reversibilitat i espontaneïtat. Segon principi de la termodinàmica. Entropia. Càlculs d'entropia. Interpretació microscòpica de l'entropia.

7. Criteris d'Espontaneïtat i Equilibri

Energies de Helmholtz i Gibbs. Criteris d'espontaneïtat i equilibri. Equacions fonamentals de Gibbs. Sistemes de composició variable : potencial químic.

8. Funcions Termodinàmiques de Reacció

Termoquímica. Estats de referència. Entalpia estàndard de reacció. Llei de Hess. Entalpia estàndard de formació. Entropies i energies lliures de reacció i formació. Tercer principi de la termodinàmica : entropies absolutes. Dependència de $\Delta_r H^0$, $\Delta_r S^0$ i $\Delta_r G^0$ amb la temperatura. Mètodes aproximats.

Equilibri

9. Equilibri de Fases

Condicció d'equilibri de fases. Regla de les fases. Diagrama de fases de sistemes monocomponent. Equació de Clapeyron. Dissolucions ideals. Llei de Raoult. Dissolució diluïda ideal : llei de Henry. Propietats col·ligatives. Dissolucions reals. Equilibri de Fases de Sistemes Multicomponent.

10. Equilibri Químic

Condicció d'equilibri d'una reacció química. Canvi d'energia de Gibbs d'una reacció. Equilibri químic en sistemes gasosos homogenis. Constant termodinàmica d'equilibri. Influència de la temperatura i la pressió en l'equilibri. Equació de Van't Hoff. Equilibri en sistemes heterogenis.

Bibliografia :

- I. N. Levine, *Physical Chemistry*, 5th Edition, McGraw Hill, 2002. (Edició traduïda : *Fisicoquímica*, 2 volums, McGraw Hill, 2003)
- P. W. Atkins, J. de Paula, *Atkins' Physical Chemistry*, 7th Edition, Oxford University Press, 2002. (Edició traduïda : *Química Física* 6^a Ed, Omega, 1999)
- D. W. Ball, *Physical Chemistry*, Brooks Cole, 2002. (Edició traduïda : *Fisicoquímica*, International Thomson Eds, 2004)
- J. I. Steinfeld, J. S. Francisco, W. L. Hase, *Chemical Kinetics and Dynamics*, 2nd Edition, Prentice Hall, 1998.
- J. Claret, F. Mas, F. Sagués, *Termodinàmica Química i Electroquímica*, Llibres de l'Índex, 1996.

Professors :

- Teoria : Ricard Gelabert
Facultat de Ciències, Departament de Química, C7-141
E-Mail : ricard.gelabert@uab.cat
WWW : <http://qf.uab.cat/ricard>
- Problemes : Juan Manuel Ortiz
Facultat de Ciències, Departament de Química, C7-157
E-Mail : juanma@qf.uab.cat

Consultes : concerteu hores de consulta per E-Mail.