

ASSIGNATURA: Físico-Química

Codi: 26051

Tipus Assign.: Troncal
Crèdits Totals: 6

Curs: 1^{er}
Teor.: 4,5

Quad.: 1^{er}
Prob.: 1,5

Departament: Química

Curs acadèmic: 2007/2008

Professors: Miquel Moreno, Raquel Rios

e-mail: mmf@klignon.uab.cat ; raquelr@klignon.uab.cat

Objectius de l'assignatura:

Aprendre els fonaments de la termodinàmica química i les seves aplicacions a l'equilibri de fases i equilibris químics i iònics. Fonaments de la cinètica química.

Assignatures que es recomana haver cursat prèviament:

Programa:

Termodinàmica

1. *Introducció a la termodinàmica.*

Sistemes i propietats termodinàmiques. Equacions d'estat. Gasos ideals i reals. Concepte de temperatura. Calor i treball. Processos reversibles i irreversibles.

2. *Principis de la termodinàmica*

Energia interna. Primer principi de la termodinàmica. Entalpia. Aplicacions a gasos ideals. Termoquímica. Entropia. Segon principi de la termodinàmica. Càlculs de variació d'entropia en gasos ideals. Tercer principi de la termodinàmica.

3. *Espontaneïtat i equilibri material*

Energies de Gibbs i de Helmholtz. Criteris d'espontaneïtat i equilibri en sistemes tancats. Sistemes de composició variable. Potencial químic.

Equilibri

4. *Equilibri de fases. Dissolucions*

Condicció d'equilibri de fases. Diagrama de fases d'una substància pura. Dissolucions ideals. Llei de Raoult. Dissolució diluïda ideal. Llei de Henry. Propietats col·ligatives.

5. *Equilibri químic*

Condicció d'equilibri químic. Constant d'equilibri. Equilibri en reaccions gasoses. Desplaçament de l'equilibri. Principi de Le Chatelier. Equilibris heterogenis.

6. Equilibris iònics

Electròlits. Autoionització de l'aigua. Àcids i bases. Definició de pH. Hidròlisi de les sals. Equilibris d'hydròlisi. Dissolucions amortidores. Valoracions àcid-base. Equilibris de formació de complexos. Equilibris de solubilitat. Solubilitat i acidesa. Solubilitat i complexació.

7. Equilibri electroquímic

Potencial electroquímic. Elèctrodes reversibles. Força electromotriu (fem) de les piles. Lleis de Faraday. Potencials estàndard d'electrode. Equació de Nernst. Equilibris d'oxidació-reducció. Electròlisi.

Cinètica química

8. Introducció a la cinètica química

Velocitat de reacció. Ordre de reacció. Constant de velocitat. Equacions integrades de velocitat. Dependència de la constant de velocitat amb la temperatura. Llei d'Arrhenius

9. Mecanismes de reacció

Reaccions elementals. Mecanismes complexos. Determinació del mecanisme de reacció. Aproximacions de l'estat estacionari i d'equilibri. Catàlisi homogènia i heterogènia.

Sistema d'avaluació:

Examen al final del curs (teòric i pràctic)

Bibliografia:

- I.N. Levine, *Fisicoquímica*. Vol. 1-2. Quinta Edición. McGraw Hill. New York. 2003.
- P.W. Atkins, *Physical Chemistry*. Seventh Edition. Oxford University Press. Oxford. 2002.
- E. Brillas, R.M. Bastida, F. Centellas, X. Domènech, *Conceptes de Termodinàmica Química i Cinètica*. Publicacions i Edicions Universitat de Barcelona. Barcelona. 2004.
- P. W. Atkins, J. de Paula, *The Elements of Physical Chemistry*. Oxford University Press, Oxford, 2005
- D.W. Ball, *Fisicoquímica*. Thomson. 2004.
- R. Chang, *Química*. 9ª edición. McGraw-Hill, 2007
- R.H. Petrucci, W.S. Harwood, F.G. Herring, *Química General*. 8ª edición, Pearson, 2003