
TERMODINÀMICA**1. Introducció**

- Sistemes termodinàmics.
- Propietats termodinàmiques.
- Equilibri termodinàmic.
- Equacions d'estat.
- Gasos ideals i reals.

2. Primer Principi

- Calor i treball.
- Processos reversibles i irreversibles.
- Primer principi de la Termodinàmica. Energia interna.
- Entalpia.
- Aplicacions a gasos ideals.

3. Termoquímica

- Entalpia de formació. Estats de referència.
- Llei de Hess.
- Llei de Kirchoff.
- Energies d'enllaç.

4. Segon i Tercer Principis

- Reversibilitat i espontaneïtat.
- Segon principi. Entropia.
- Càlculs de canvis entròpics en gasos ideals.
- Tercer principi.

5. Espontaneïtat i equilibri

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

6. Equilibri de fases

- Condició d'equilibri de fases. Regla de les fases.
- Diagrama de fases d'una substància pura.
- Les equacions de Clapeyron i de Clausius-Clapeyron.

7. Dissolucions

- Dissolucions ideals. Llei de Raoult.
- Dissolucions diluïdes ideals. Llei de Henry.
- Propietats col·ligatives.

8. Equilibri químic

- Condició general d'equilibri químic.
- Equilibri en reaccions gasoses. Constant termodinàmica d'equilibri.
- Influència de la temperatura. Equació de van't Hoff.
- Desplaçament de l'equilibri. Principi de Le Chatelier.

CINÈTICA QUÍMICA

9. Introducció a la Cinètica Química

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

10. Mecanismes de reacció

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

11. Cinètica molecular

- Teoria de les col·lisions.
- Superfícies d'energia potencial.
- Teoria de l'estat de transició.

Bibliografia

- **P.W. Atkins**, *Physical Chemistry*, Eighth Edition, Oxford University Press. 2006.
- **P.W. Atkins, L. Jones**, *Principios de Química*, 3ªedic., Ed. Panamericana, 2006.
- **E. Brillas, R.M. Bastida, F. Centellas, X. Domènech**, *Conceptes de Termodinàmica Química i Cinètica*. Universitat de Barcelona. Barcelona. 2004.
- **J. Claret, F. Mas, F. Sagués**, *Termodinàmica Química i Electroquímica*, Llibres de l'Índex, 1996.
- **M.D. Reboiras**, *Química, la ciencia bàsica*, Ed. Thomson, 2006.

Professorat

Teoria: Antoni Oliva (antoni.oliva@uab.cat) C7-147

Problemes: Àngels González-Lafont (angels.gonzalez@uab.cat) C7-135 (grup 2)

Esther Gorrea (esther.gorrea@uab.cat) C7-149 (grup 1)

Jaume Tomàs (jaume.tomas@uab.cat) (grups 1 i 2)