

Llicenciatura de Biotecnologia

Curs 2008-09

Codi assignatura : 25402

## TERMODINÀMICA I CINÈTICA QUÍMICA

### Cinètica Química

#### 1. Conceptes Fonamentals de Cinètica Química

Aspectes termodinàmics i cinètics d'una reacció química. Reacció elemental o complexa. Definició de velocitat de reacció. Equació de velocitat. Equacions integrades de velocitat. Període de semireacció. Efecte de la temperatura sobre les velocitats de reacció. Resum de les tècniques cinètiques experimentals.

#### 2. Mecanismes de Reacció

Mecanisme de reacció. 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

Sistemes termodinàmics. Propietats termodinàmiques. Equilibri termodinàmic. Gasos ideals. Gasos reals.

#### 5. Primer Principi de la Termodinàmica

Energia, calor i treball. Primer principi de la Termodinàmica. Capacitats calorífiques. Entalpia. Variació de l'energia interna i l'entalpia amb la temperatura. Aplicació a gasos ideals.

#### 6. Segon Principi de la Termodinàmica

Espontaneïtat. Segon principi de la termodinàmica. Definició macroscòpica d'entropia. Càlculs d'entropia : exemples. Interpretació microscòpica de l'entropia.

#### 7. Criteris d'Espontaneïtat i Equilibri

Equilibri material. Desigualtat de Clausius. Equació fonamental de la Termodinàmica. Variables naturals. Energia lliure de Helmholtz. Energia lliure de Gibbs. Criteris d'espontaneïtat i equilibri. Aplicacions.

#### 8. Funcions Termodinàmiques de Reacció

Termoquímica. Calor de reacció. Estat estàndard i estat de referència. Entalpia de reacció i de formació estàndard. Lleis de la Termoquímica. Dependència de l'entalpia de reacció amb la temperatura : Llei de Kirchoff. Tercer principi de la Termodinàmica. Entalpia i energia lliure de reacció.

## Equilibri

### 9. Equilibri material I : Equilibri de Fases

Sistemes de composició variable : potencial químic. Condició d'equilibri de fases. Regla de les fases. Diagrama de fases de sistemes monocomponent. Equació de Clapeyron.

### 10. Equilibri material II : Termodinàmica de mescles

Mescles homogènies. Propietats molars parcials. Mescles de gasos ideals. Dissolucions líquides ideals. Dissolucions líquides diluïdes. Propietats col·ligatives. Diagrama de fases de mescles.

### 11. Equilibri material III : Equilibri Químic

Condició d'equilibri d'una reacció química. Equilibri químic en mescles de gasos ideals. Constant termodinàmica d'equilibri. Equilibri químic en fases condensades. Dependència de la constant d'equilibri amb la temperatura. Desplaçament de l'equilibri.

## 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*, 8th Edition, Oxford University Press, 2006. (Edició traduïda : *Química Física* 6<sup>a</sup> Ed, Omega, 1999)
- P.W. Atkins, J. de Paula, *Elements of Physical Chemistry*, 4a ed. Oxford University Press, Oxford, 2005.
- A. Aguilar, E. Gómez, J. M. Lucas, *Cinètica Química*, Llibres de l'Índex. Universitat, 1997.
- S.R. Logan, *Fundamentos de Cinètica Química*, Addison Wesley iberoamericana, 2000.
- D. W. Ball, *Physical Chemistry*, Brooks Cole, 2002. (Edició traduïda : *Fisicoquímica*, International Thomson Eds, 2004)
- E. Brillas, R. M. Bastida, F. Centellas, X. Domènech, *Conceptes de Termodinàmica Química i Cinètica*, Publicacions i Edicions de la Universitat de Barcelona, 2004.

Professora de Teoria : Mireia Garcia, Departament de Química (Química Física), C7-145, E-Mail : [mireia.garcia@uab.cat](mailto:mireia.garcia@uab.cat)

Professor de Problemes : Jaume Tomàs, Departament de Química i IFAE, E-Mail : [jaume.tomas@uab.cat](mailto:jaume.tomas@uab.cat)