

# QUÍMICA

Assignatura Troncal de 7.5 crèdits ( 4.5 de teoria + 1.5 de problemes + 1.5 de pràctics)

Professor: Xavier Giménez  
(Departament: Química Física)

## 1. Programa:

- 1 **Conceptes fonamentals**  
Moviment: canvis en espai i temps. Força i massa. Moment. Forces fonamentals. Treball i energia. Mesura.
- 2 **Àtoms i molècules**  
L'existència dels atòms. Els elements. La combinació química. Molècules. Estequiometria.
- 3 **Reaccions prototípiques**  
La naturalesa de les reaccions químiques. Àcids, bases i sals. Reducció i oxidació. Dissolució i precipitació. Reaccions amb radicals. Catàlisi.
- 4 **Llum i matèria: ones i/o partícules**  
Llum: ones electromagnètiques. Matèria: partícules de l'àtom. Llum com a partícula: efecte fotoelèctric. Matèria com a ona: espectres i ones estacionàries. Mecànica quàntica: probabilitat i incertesa.
- 5 **La teoria quàntica de l'àtom d'hidrogen**  
L'àtom. Orbitals: tres dimensions, tres números quàntics. Orbitals: tamany, forma i orientació. Espectroscòpia atòmica. El quart número quàntic.
- 6 **Propietats periòdiques dels elements**  
Orbitals en atòms polieletrònics. Configuracions electròniques. Propietats de valència i llei periòdica.
- 7 **L'enllaç covalent i els orbitals moleculars**  
Dels atòms a les molècules. Molècules diatòmiques. Enllaços en molècules. Geometria molecular. Deslocalització.
- 8 **Algunes substàncies i reaccions orgàniques i bioquímiques**  
Perquè carboni? Estructura i enllaç en hidrocarburs. Grups funcionals. Biopolímers. Resum de reaccions orgàniques. *Tema: pesticides i insecticides. Els PCBs i els efectes sobre la salut.*
- 9 **Estats de la matèria**

Classificació tradicional. Interaccions no covalents. Ordre i desordre en gasos, líquids i sòlids. L'estat sòlid. Polímers. *Tema: SO<sub>2</sub> atmosfèric i en fase aquosa.*

10 **Els gasos i la teoria cinètica**

El gas ideal. Equacions d'estat. Teoria cinètica: pressió i temperatura. *Tema: els gasos d'hivernacle: diòxid de carboni i vapor d'aigua.*

11 **Equilibri**

La naturalesa de l'equilibri. Energia, entropia i evolució cap a l'equilibri. La constant d'equilibri. Pressió de vapor i la constant d'equilibri. Equilibris en tensió. *Tema: Equilibris en el sistema carbonat càlcic – aigua – CO<sub>2</sub> atmosfèric.*

12 **Energia, calor i el canvi químic**

Treball i calor. Primera llei de la termodinàmica. Energia i entalpia. Càlculs termoquímics. Processos endotèrmics i exotèrmics. *Tema: el mecanisme de l'efecte hivernacle i el balanç energètic de la terra.*

13 **Energia lliure i la direcció del canvi**

Desordre posicional i energètic. Entropia. La segona llei de la termodinàmica. L'energia lliure. L'energia lliure i la constant d'equilibri. L'equilibri tèrmic i el significat de la temperatura.

14 **Dissolucions i solubilitat**

Soluts i dissolucions. El producte de solubilitat. Precipitació selectiva. Efectes hidrofílic i hidrofòbic. *Tema: residus, sols i sediments.*

15 **Àcids i bases**

Àcids i bases conjugades. Equilibri aquós. Neutralització. Àcids i bases febles. Tampons. *Tema: la pluja àcida i els seus efectes ecològics.*

16 **Química i electricitat**

Reaccions redox. De l'energia química al treball elèctric. Semireaccions i igualació. Electròlisi. *Tema: Química dels processos d'oxidació-reducció en aigües naturals. Tema: combustibles convencionals i alternatius.*

17 **El decurs de les reaccions químiques**

El camí cap a l'equilibri: visió macroscòpica. Control: termodinàmica, cinètica i catàlisi. Mecanismes de reacció. *Tema: Destrucció catalítica i no catalítica de l'ozó estratosfèric.*

18 **Espectroscòpia i anàlisi**

La interacció entre llum i matèria. Espectrometria de masses. Cromatografia. *Tema: anàlisi instrumental ambiental, determinació de NO<sub>x</sub> per quimiluminiscència.*

19 **Els elements dels grups principals I**

Hidrogen. Metalls alcalins. Metalls alcalinoterris. La família del Bor. La família del Carboni. *Tema: els radicals lliures: producció i destí.*

20 **Els elements dels grups principals II**

La família del nitrogen. La família de l'oxigen. Els halogens. Els gasos nobles. *Tema: Els clorofluorocarbons. Compostos amb Br i I.*

21 **Els metalls de transició i els seus complexos**

Els elements del bloc d i els seus compostos. Complexes de coordinació. Enllaç: teoria del camp cristal·lí. *Tema: Metalls pesats tòxics: mercuri, plom i cadmi.*

22 **Química nuclear**

Relativitat i el significat de  $E=mc^2$ . Estabilitat nuclear. Reaccions nuclears. Energia nuclear. *Tema: Reactors de fissió i fusió. El plutoni.*

**Programa de Pràctiques:**

- 1 Estructura molecular. Us de models moleculars.
- 2 Síntesi i identificació de compostos orgànics. Separació cromatogràfica.
- 3 Dissolucions i electròlits
- 4 Reaccions químiques i velocitat de reacció
- 5 Anàlisi quantitativa. Volumetries.

**2. Bibliografia:**

- Peter W. Atkins i Loretta Jones: "Química: Moléculas, materia, cambio". Editorial Omega, S.A., Barcelona, 1998.
- Michael Munowitz: "Principles of Chemistry". W.W. Norton & company, New York, 2000.
- Xavier Domènech, Enric Brillas, Francesc Centellas i Rosa M. Bastida: "Fonaments de termodinàmica, electroquímica i cinètica", Ed. Barcanova, Barcelona, 1992, i "Fonaments d'estructura atòmica i de l'enllaç químic", Barcanova, Barcelona, 1992.
- Colin Baird: "Química Ambiental". Ed. Reverté, S.A., Barcelona, 2001.

**3. Criteris d'avaluació:**

Els continguts del curs s'avaluaran a partir de l'examen al final del quadrimestre. La puntuació final estarà influenciada pel seguiment dels exercicis durant tot el curs, així com per l'avaluació del treball efectuat a les sessions pràctiques.