

1.- Identificació de l'assignatura

Nom de l'assignatura: Química

Codi: 23812

Nombre de crèdits: 6.0

2.- Contingut i Objectius Educatius de l'assignatura.

1. ESTRUCTURA ELECTRÒNICA DELS ÀTOMS

Antecedents històrics. Mecànica quàntica: ones i partícules. L'àtom d'hidrogen. Concepte d'orbital atòmic i representació dels orbitals. Funció de spin.

PRINCIPALS OBJECTIUS A ASSOLIR: Adquirir consciència de la necessitat de l'evidència experimental en el món de la química. Adquirir nocions generals sobre la història del descobriment de l'àtom i els seus components i sobre les propietats d'aquests. Entendre els diferents models atòmics proposats al llarg de la història i el perquè de l'aparició de la mecànica quàntica. Entendre i saber aplicar correctament el model atòmic de Bohr en la interpretació dels espectres atòmics. Entendre les conseqüències de l'aparició de la mecànica quàntica a l'hora d'interpretar el comportament de les partícules microscòpiques: entendre els conceptes *funció d'ona*, *probabilitat*, *quantització de l'energia* i *estats degenerats*. Entendre el concepte d'orbital atòmic i conèixer la seva representació en l'espai en funció dels valors dels nombres quàntics n , l , m_l i m_s en el cas de l'àtom d'hidrogen.

2. ÀTOMS POLIELECTRÒNICS

Principi d'exclusió de Pauli. Regla de Hund. Orbitals i nivells d'energia. Apantallament dels electrons i càrrega nuclear efectiva. Configuracions electròniques.

PRINCIPALS OBJECTIUS A ASSOLIR: Entendre l'efecte apantallant dels electrons en els àtoms polieletrònics i com aquest fet afecta l'energia de cadascun dels electrons del sistema. Comprendre el principi d'Aufbau a partir dels diagrames d'energia dels electrons en els àtoms polieletrònics. Saber deduir la configuració electrònica de qualsevol àtom a partir de l'assimilació dels principis d'Aufbau i d'exclusió de Pauli i la regla de Hund. Entendre el concepte de capa de valència en els elements dels grups principals i de transició i saber quins seran en cada cas els electrons més fàcilment arrencables.

3. LA TAULA PERIÒDICA

Ordenació dels elements. Classificació dels elements: grups, períodes, blocs, caràcter metàl·lic i estat físic. Propietats periòdiques dels elements: radi atòmic, radi iònic, potencial d'ionització, afinitat electrònica i caràcter metàl·lic. Propietats dels àtoms enllaçats: estat d'oxidació i electronegativitat.

PRINCIPALS OBJECTIUS A ASSOLIR: Saber deduir per a un element qualsevol a quin grup, període i bloc pertany. Saber quin és l'estat físic dels elements en condicions normals. Entendre quins són els factors que determinen la variació de les propietats periòdiques (radi, P.I., A.E., electronegativitat, caràcter metàl·lic). Saber quines són les anomalies en el P.I. i l'A.E. dels elements dels grups principals i per què tenen lloc. Entendre el concepte de P.I. successius i ésser capaç de preveure qualitativament com augmentaran per a un element qualsevol del bloc s o p . Entendre les diferents maneres de quantificar l'electronegativitat. Entendre la relació entre caràcter metàl·lic i caràcter àcid-base dels òxids respectius d'un element. Tenir una noció general de la variació dels E.O. al llarg de la T.P. Saber relacionar la variació de totes les propietats periòdiques, i.e., entendre com de lligades estan les unes amb les altres.

4. GENERALITATS DE L'ENLLAÇ QUÍMIC

Tipus de substàncies. Models d'enllaç. Paràmetres energètics i estructurals.

PRINCIPALS OBJECTIUS A ASSOLIR: Saber les diferències principals entre les propietats físiques dels compostos iònics, covalents i metàl·lics. Entendre el paper que juga l'electronegativitat dels elements que es combinen a l'hora de definir el tipus de compostos que formaran. Tenir nocions dels valors més usuals de distàncies i energies d'enllaç dels compostos covalents. Entendre el concepte termodinàmic d'energia d'enllaç.

5. L'ENLLAÇ EN LES MOLÈCULES

L'enllaç per parells d'electrons: estructures de Lewis-Langmuir. Teoria de la repulsió dels parells electrònics de la capa de valència (TRPECV). Model de l'enllaç de valència (TEV). Polaritat de les molècules. Hibridació: el cas del metà, età, etilè i acetilè.

PRINCIPALS OBJECTIUS A ASSOLIR: Saber comptar els electrons de valència de qualsevol molècula covalent i saber representar-ne les estructures de Lewis-Langmuir més representatives. Entendre i saber aplicar la regla de l'octet i els conceptes *valència*, *ordre d'enllaç* i *càrrega formal*. Entendre els conceptes *estat excitat de valència*, *compost hipovalent*, *compost hipervalent* i *enllaç covalent coordinat*. Entendre i saber aplicar el concepte de ressonància. Entendre i saber aplicar la TRPECV. Assimilar la utilitat del concepte de *molècules isoelectròniques*. Ésser capaç de deduir per a molècules covalents senzilles la presència o absència d'un moment dipolar elèctric. Entendre la descripció de la molècula d'hidrogen segons la Teoria de l'enllaç de valència. Entendre la diferència entre els recobriments σ i els recobriments π . Entendre el concepte d'hibridació i la seva utilitat i pertinença. Saber veure quines molècules es poden descriure a partir de la hibridació sp , sp^2 o sp^3 de l'àtom central. Entendre el concepte de rotació impedida en el cas de les molècules amb enllaços dobles. Entendre els conceptes *àcid de Lewis* i *base de Lewis* (enllaç covalent coordinat). Entendre la descripció del sistema π deslocalitzat del benzè a partir de la TEV.

6. QUÍMICA DEL CARBONI (I)

Orígens de la Química Orgànica i els cicles de la natura. Alteracions dels cicles a causa de la química sintètica. La problemàtica del clor i els contaminants orgànics persistents (COPs). Particularitat del carboni. Hidrocarburs alifàtics i aromàtics: derivats halogenats i reactivitat. Alcohols, èters i tiols. El grup carbonil: aldehids i cetones. El grup carboxil: àcids i derivats. El grup amino i derivats.

PRINCIPALS OBJECTIUS A ASSOLIR: Adquirir nocions sobre la història de la química orgànica sintètica i de la problemàtica que per als cicles de la natura comporta la producció de productes sintètics nous. Adquirir consciència de l'extrema versatilitat que presenta la química del C i de la transcendència que aquest fet té per a la vida a l'univers. Saber el sistema de classificació dels hidrocarburs i la seva nomenclatura. Prendre consciència de la mobilitat dels enllaços en els hidrocarburs saturats. Entendre els conceptes *conformació* i *isomeria geomètrica* i la seva importància en el món de la química, la biologia i la medicina. Entendre el concepte *aromaticitat*. Prendre consciència de l'elevada toxicitat dels derivats halogenats del benzè. Saber formular i anomenar segons la normativa IUPAC els compostos orgànics que contenen un o més dels grups funcionals més freqüents (alcohols, èters, tiols, aldehids, cetones, àcids, anhídrids, esters, amines, imines, nitrils, amides i nitroderivats). Conèixer el concepte àcid-base de Brønsted i com es forma l'esquelet polipeptídic de les proteïnes.

7. QUÍMICA DEL CARBONI (II)

Compostos orgànics i toxicitat. Pesticides: insecticides, herbicides i fungicides. Fonts de dioxines. Bifenils policlorats (PCBs) i dibenzofurans policlorats (PCDFs). Hidrocarburs aromàtics polinuclears (PAHs).

PRINCIPALS OBJECTIUS A ASSOLIR: Adquirir consciència de la importància i la necessitat de dissenyar nous pesticides menys agressius per al medi ambient. Aprendre el concepte *bioacumulació*. Conèixer els problemes mediambientals provocats pels pesticides més perillosos emprats en el passat. Conèixer quins són els pesticides més emprats en l'actualitat. Saber què són i com es generen les dioxines. Conèixer la problemàtica mediambiental dels PCBs i la formació de PCDFs a partir dels primers. Saber quins PCBs, PCDFs i dioxines són els més tòxics de tots i estar al corrent de la polèmica actual sobre la toxicitat en els humans d'aquestes tres famílies de compostos. Conèixer les formes més habituals de generació de PAHs i la nomenclatura i toxicitat dels més perillosos.

8. L'ENLLAÇ EN ELS SÒLIDS

Els metalls: estructures i propietats. Sòlids iònics: estructures i propietats. Enllaç iònic: consideracions termodinàmiques, energia reticular. Sòlids covalents: estructures i propietats. Sòlids moleculars: forces de van der Waals, enllaç d'hidrogen.

PRINCIPALS OBJECTIUS A ASSOLIR: Entendre els conceptes *sòlid cristal·lí, cel·la unitat, nombre i geometria de coordinació i fracció de volum ocupat*. Entendre el model de bandes de l'enllaç metàl·lic i les diferències entre els metalls (conductors), semimetalls i semiconductors i els no metalls (aïllants). Conèixer i entendre les relacions estructurals entre els metalls i els compostos iònics i les propietats físiques dels darrers. Entendre des d'un punt de vista termodinàmic per què existeixen i són estables els compostos iònics. Conèixer la definició d'energia reticular i ésser capaç de generar un cicle termodinàmic de Born-Haber que permeti calcular-la per a un sòlid iònic qualsevol. Conèixer la relació entre U_{ret} i les diverses propietats físiques dels sòlids iònics. Entendre la diferència conceptual i de propietats físiques entre els sòlids covalents i els moleculars. Conèixer l'existència del fenomen del polimorfisme en els sòlids covalents. Saber els diferents tipus de forces de curt abast que poden actuar en els sòlids moleculars i conèixer-ne la seva naturalesa i la seva intensitat relativa. Poder ordenar en base al punt anterior els p_{fus} o p_{eb} de diferents compostos moleculars. Conèixer l'origen i la naturalesa de l'enllaç d'hidrogen i tenir present la seva gran importància en el món de la bioquímica i de la vida.

9. METALLS PESANTS I QUÍMICA DEL SÒL

Problemàtica mediambiental deguda als metalls pesants. Formes tòxiques conegudes i efectes sobre la salut humana i el medi natural. El paper del sòl en la química dels metalls pesants.

PRINCIPALS OBJECTIUS A ASSOLIR: Prendre consciència de la problemàtica mediambiental deguda als metalls pesants (Hg, Pb, Cd, Sn, Cr) i l'As. Entendre que el grau de toxicitat dels metalls pesants depèn de la forma química en què es troben. Conèixer per a cada metall quines són les formes més tòxiques conegudes, com es generen i quins són els seus efectes per a la salut humana. Tenir nocions dels usos més habituals d'aquests metalls bé en forma pura bé com a derivats tant en el passat com en el present. Conèixer el paper d'intercanviador de metalls dels aluminosilicats i el paper segrestador de metalls de l'humus.

3.- Hores que ha de dedicar l'alumne per tal de superar l'assignatura.

ACTIVITATS PRESENCIALS	Classes de teoria	35	
	Classes de problemes	10	
	Classes de pràctiques		
	Classes de pràctiques de camp		
	Activitats tutoritzades	8	
	Realització de proves parcials	1	
	Realització d'exàmens finals	3	
ACTIVITATS NO PRESENCIALS	Estudi/Preparació de teoria	25	
	Realització/Preparació de problemes	15	
	Recerca Bibliogràfica	5	
	Preparació de pràctiques (tot tipus)		
	Preparació/Correcció de treballs	8	
	Preparació/Correcció d'exàmens	10	
TOTAL		120	

4.- Capacitats o destreses a adquirir.

Aprendre a relacionar entre si les observacions que es poden fer en el món macroscòpic (temperatura d'ebullició, solubilitat, conductivitat, reactivitat, etc.) a partir dels coneixements que es tenen del comportament de la matèria a nivell microscòpic (estructura electrònica, propietats atòmiques i tipus d'enllaç químic).

En la part final del curs caldrà saber relacionar els conceptes d'enllaç i estructurals descrits amb els cicles de la natura i els processos de contaminació més rellevants.

5.- Requisits previs.

Preferiblement haver cursat matemàtiques, física i química durant el Batxillerat o si més no els cursos propedèutics a la UAB. Conèixer la nomenclatura bàsica dels compostos inorgànics (àcids, bases i sals).

6.- Metodologia.

Els alumnes disposaran d'apunts per a les sessions de teoria. Es faran diverses sessions tutoritzades amb la participació del professor de teoria i un professor de problemes. Durant aquestes sessions es proposarà als alumnes de resoldre problemes en grup i també se'ls proposarà de plantejar-se possibles preguntes d'examen, les quals hauran de resoldre els seus companys i que seran també comentades entre tots a la següent classe. Hi haurà també un llistat de problemes amb les solucions respectives.

També es farà ús del campus virtual, on s'hi penjaran preguntes d'autoavaluació amb les respostes corresponents i petits programes informàtics que ajudaran a entendre els conceptes exposats a classe. També es proporcionaran als alumnes adreces web útils i complementàries per al seu aprenentatge.

7.- Avaluació.

L'avaluació de l'alumne es basarà en dos exàmens obligatoris (un examen parcial i un examen final) i si és el cas també un seminari optatiu.

Examen parcial: L'examen parcial serà el dia 29 d'octubre de 2007 a l'hora de classe de teoria (1h de durada). Aquest examen és obligatori si es vol aprovar l'assignatura en primera convocatòria i versarà sobre els Temes 1 a 3. El pes d'aquest examen en el global de l'assignatura serà del 30% en el cas que el parcial s'aprovi amb una nota més alta que l'examen final (en el cas que es suspengui el parcial o bé que s'aprovi amb una nota inferior a la del final no es tindrà en compte aquest examen en la qualificació final). Encara que s'aprovi, l'examen parcial no allibera matèria.

Examen final: L'examen final serà el dia 11 de febrer de 2008 a les 9:30 del matí i serà de tres hores de durada. Per poder aprovar l'assignatura cal treure com a mínim una nota igual o superior a 4.5 en l'examen final. Si l'alumne va aprovar el parcial amb una nota superior a la del final se li farà mitjana (30% nota parcial + 70% nota final). Si no és el cas, la nota global de l'assignatura serà només la de l'examen final. L'assignatura només s'aprovarà si la nota global és igual o superior a 5.0.

**** NOTA:** En el cas que un alumne s'hagi de presentar a l'examen final en 2a convocatòria (4 de juliol de 2008 a les 3:30 de la tarda) **només es tindrà en compte la nota de l'examen parcial i el seminari voluntari si es va presentar també a l'examen final de febrer**. Si és la primera vegada que es presenta a un examen final no es valoraran els resultats trets en les proves efectuades al llarg del curs, independentment de les qualificacions obtingudes. **

Seminari optatiu: En el decurs dels Temes 7 i 9 hi ha la possibilitat que grups de voluntaris de 3 persones facin un treball relacionat amb el temari per tal que l'exposin a classe (10 min. presentació). Aquest exercici pot permetre a l'alumne sumar 0 -1 punts a criteri del professor sobre la qualificació final de l'assignatura (després de tenir en compte les notes dels exàmens parcials i finals). No obstant, només s'aplicarà aquest increment de qualificació en el cas que l'alumne hagi superat l'assignatura (nota promig dels dos exàmens de 5.0 o superior). La nota serà individual i no pas de grup, de manera que persones del mateix grup poden obtenir qualificacions diferents del

treball. Per tal de discernir entre alumnes, caldrà que cadascun dels membres del grup que ha fet el treball responguin en públic almenys una qüestió que plantegi el professor. D'altra banda, els materials elaborats pels alumnes seran penjats al Campus Virtual i podran ser susceptibles de ser preguntats a l'examen final tant de febrer com de juliol.

8.- Bibliografia.

Temes 1-5, 8:

- *Estructura atómica y enlace químico*. J. Casabó; Ed. Reverté (1996)
Aquest llibre conté tota la informació bàsica sobre les propietats de l'àtom, dels elements químics, de l'enllaç químic i dels sòlids. Conté exemples i dibuixos molt aclaridors.
- *Fonaments d'estructura atòmica i enllaç químic*. F. Centelles, E. Brillas, X. Domènech, R. M. Bastida; Barcanova, Edicions de la UB (1992)
Aquest llibre permet aprofundir més des d'un punt de vista físic en les propietats de l'àtom i l'estat sòlid. Especialment útil per als temes 1, 2 i 8.
- *Cálculos básicos en estructura atómica y molecular*. M. Paraira, J. J. Pérez; Ed. Vicens-Vives (1988)

Temes 6, 7 i 9:

- *Introducción a la nomenclatura química inorgánica i orgánica (5a edició)* J. Sales, J. Vilarrassa; Ed. Reverté (2003)
Aquest llibre és aconsellable per adquirir els conceptes bàsics de química orgànica que s'explicaran en el tema 6 del curs.
- *Química Ambiental*. C. Baird; Ed. Reverté (2001)
- *Contaminación ambiental. Una visión desde la Química*. Orozco et al. Ed. Thomson Paraninfo
- *Química Ambiental de sistemas terrestres*. X. Domènech, J. Peral; Ed. Reverté (2006)
Aquests llibres són bàsics per entendre els processos químics de la contaminació que s'explicaran en els temes 7 i 9 del curs.

General:

- *Principios esenciales de Química General*. R. Chang; 4a. Ed. McGraw-Hill (2006)
- *Química*. R. Chang; 9a. Ed. McGraw-Hill (2007)

9.- Professorat.

Roger Bofill Arasa (Torre Química, 3^a planta, despatx C7-310) c/e: Roger.Bofill@uab.cat

Vicenç Branchadell (Torre Química, 1^a planta, despatx C7-133) c/e: Vicenc.Branchadell@uab.cat