

PROGRAMA DE QUÍMICA GENERAL (1^{er} Curs de Química)

I. REACCIONS QUÍMIQUES

I.A. Estequiomètria i bases de la Teoria Atòmica

1. Lleis ponderals de les combinacions químiques.
Teoria atòmica de Dalton.
Llei dels volums de combinació.
Principi d'Avogadro
Concepte de mol.
2. Concepte de massa equivalent.
Representació d'una reacció química.
Càlculs estequiomètrics.
3. Reaccions red-ox.
Potencial d'elèctrode.

I.B. L'equilibri Químic

4. Constant d'equilibri.
Principi de Le Châtelier.
Factors externs que influeixen sobre l'estat d'equilibri d'un sistema.

I.C. Equilibri iònic

5. Introducció a l'estudi de l'equilibri iònic.
Electròlits. Conductivitat específica i equivalent.
Teoria d'Arrhenius. Grau de dissociació.
Característiques de l'aigua com a solvent. Teoria de Debye-Hückel.
6. Àcids i bases. Teories i definicions històriques.
Autoionització de l'aigua. Definició de pH.
Força relativa del parell àcid-base pKa.
Predicció d'una reacció àcid-base.
7. Balanç de materia en electròlits forts i débils.
Regla d'electroneutralitat. Balanç elèctric.
Càlcul rigorós del pH d'una solució aquosa d'un parell àcid-base. Fórmula general.
8. Càlcul del pH d'una solució d'àcid o base forts.
Càlcul del pH d'una solució d'un àcid débil o d'una sal de catió àcid i anió neutre.
Càlcul del pH d'una solució d'un àcid débil o d'una sal d'anió bàsic i de catió neutre.
9. Càlcul de pH de mesclades d'àcids i bases conjugats.
Solutions reguladores de pH. Preparació i propietats.
Capacitat reguladora.

10. Càlcul del pH d'una mescla de parells àcid-base.

Aplicacions de la fórmula general:

- càlcul del pH en el punt d'equivalència.
- pH de solucions aquoses de sals formades per un catió àcid i un anió bàsic.
- pH de mesgles equimoleculars de sals i d'àcids o bases..
- pH de "sals àcides" de catió neutre.
- pH d'una solució d'un àcid polipròtic.

11. Valoracions àcid-base. Punt d'equivalència.

Curves de neutralització.

Indicadors.

I.D. Equilibris de complexació

12. Introducció. Convenis. Àcids de Lewis.

Constants d'estabilitat i constants de formació dels complexos.

Complexos i acidesa.

I.E. Equilibris de precipitació

13. Solubilitat i producte de solubilitat d'un sòlid poc soluble en aigua.

Efecte d'altres soluts en la solubilitat d'una substància.

Efecte de la Temperatura en la solubilitat d'una substància.

14. Solubilitat i acidesa.

Solubilitat i complexació.

Precipitació fraccionada.

I.F. Equilibris d'extracció

15. Constant de repart.

Eficiència d'una operació d'extracció.

I.G. Termoquímica

16. Sistema. Estats d'un sistema. Funcions d'estat.

Equació d'estat.

Primer Principi de Termodinàmica.

Calor i treball.

17. Mesura de la calor de reacció.

Definició d'entalpia.

Relació entre ΔE i ΔH .

Equacions termoquímiques.

18. Determinació indirecta de la calor de reacció (Llei de Hess).
 Entalpia standar de formació i entalpia standar de reacció.
 Dependència de H amb ΔT (Llei de Kirchhoff).
 Energies d'enllaç.

I.H. Termodinàmica

19. Reversibilitat i espontaneitat d'un procés.
 Segon Principi de la Termodinàmica.
 Definició i càlcul de la entropia.
 Variació de l'entropia amb T .
 Tercer Principi de la Termodinàmica. Entropies absolutes.
20. Energia lliure. Criteri d'espontaneitat.
 Significat físic de ΔG a T i P constants.
 Variació de G amb la pressió.
 Relació entre ΔG° i l'estat d'equilibri.
 Relació entre ΔG° i el sentit d'evolució d'un procés.
21. Energies lliures standar de formació i de reacció.
 Dependència de ΔG amb T i P .
 Relació quantitativa entre ΔG° i la ct. d'equilibri d'una reacció.
 Dependència de la ct. d'equilibri amb la temperatura.
22. Concepte d'activitat.
 Expressions de la ct. d'equilibri.
 Relació entre K_c , K_p i K_x per reaccions entre gasos.

I.J. Equilibris d'oxidació-reducció

23. Grau d'oxidació. Definicions.
 Piles electroquímiques. Convenis.
 Mesures de la f.e.m. d'una pila.
 Equació de Nerst.
 Relació entre ΔG , fem d'una pila i ct. d'equilibri d'una reacció.
24. Potencial d'elèctrode. Potencial normal.
 Potencials de reducció a 25°C.
 Factors que influeixen en el potencial d'electrode: formació de complexos, acidesa del medi, precipitació d'alguna de les espècies del parell red-ox.
25. Càlcul de K_p s.
 Mesura de pH. Elèctrodes de vidre i de referència.
 Electròlisi.
 Lleis de Faraday.

I.K. Cinètica

26. Velocitat d'una reacció i estat d'equilibri.
Velocitat neta d'una reacció.
Factors que afecten la velocitat de reacció.
Reaccions elementals.

27. Efectes de la concentració. Lleis diferencials de la velocitat.
Ordre total d'una reacció.
Lleis integrades de la velocitat.
Vida mitjana.

28. Mecanismes de reacció.
Aproximació de l'estat d'equilibri.
Aproximació de l'estat estacionari.
Reaccions en cadena.
Mecanisme de la reacció $H_2 + Br_2 \rightarrow 2 HBr$.
Relació entre constant de velocitat i constant d'equilibri.

29. Teoria de les colisions.
Dependència de la velocitat amb la T.
Control cinètic i control termodinàmic.
Catalitzadors: catalisi homogènia i heterogènia.

II. ESTATS D'AGREGACIÓ

II.A. Propietats dels gasos

30. Llei de Boyle. Llei de Charles-Gay Lussac.
Escala absoluta de temperatura.
Equació general dels gasos.
Llei de Dalton de les pressions parcials.
Llei de Graham de la difusió.

31. Gas ideal.
Teoria cinètica dels gasos. Postulats.
Deducció de la pressió d'un gas.
Deducció de les lleis dels gasos, a partir de la teoria cinètica.

32. Distribució de les velocitats moleculars. Equació de Maxwell-Boltzmann.
Capacitat calorífica d'un gas ideal monoatòmic.
Capacitats calorífiques d'un gas ideal diatòmic.

33. Gasos reals.
Forces de Van der Waals.
Equacions d'estat pels gasos reals.

II.B. Líquids i dissolucions

34. Propietats. Teoria cinètica pels líquids.
 Equilibris de fase: equilibri líquid-vapor. Pressió de vapor.
 Dependència de la pressió de vapor amb T.
35. Diagrama de fases d'una substància.
 Solucions. Unitats de concentració.
36. Solució ideal. Llei de Raoult.
 Pressió de vapor d'una solució que conté un solut no volàtil.
 Augment del pt. d'ebullició.
 Descens del pt. d'ebullició.
 Relació entre ΔT_{eb} i ΔT_{cong} amb la concentració del solut.
37. Solució de dos components volàtils i totalment miscibles.
 Diagrama pressió de vapor-composició.
 Composició de la fase líquida i de la fase vapor en equilibri.
 Pressió de vapor de mesclades de líquids reals.
38. Diagrames pt. d'ebullició-composició de mesclades binaris miscibles.
 Destil.lació de les solucions binaris miscibles.
 Azeòtrops.
 Dissolucions de gasos en líquids. Llei d'Henry.

III. ESTRUCTURA ATÒMICA I MOLECULAR

III.A. Teoria Atòmica

39. Naturalesa elèctrica de la matèria. Faraday.
 Descàrrega elèctrica en gasos: l'electró.
 Estructura de l'àtom: experiment de Rutherford.
40. Base experimental de la teoria quàntica de Plank.
 Efecte fotoelèctric.
41. Propietats ondulatòries de la radiació electromagnètica.
 Propietats corpusculars de la radiació electromagnètica.
 Espectre de la radiació electromagnètica.
 Interacció de la radiació electromagnètica-matèria.
42. L'àtom de Bohr: postulats.
 Determinació del radi i de l'energia de cada órbita d'un àtom hidrogenoide.
 Explicació de l'espectre de l'àtom de hidrogen.
43. Ondes i partícules: De Broglie.
 Principi d'incertesa: Heisenberg.
 Mecànica ondulatòria.
 Partícula en una caixa unidimensional.

44. Equació de Schrödinger per l'àtom de hidrogen.
Números quàntics.
Concepte d'orbital.
45. Descripció, significat i valors possibles dels números quàntics.
Forma i representació dels orbitalis atòmics.
46. Àtoms polielectrònics. Principi d'exclusió de Pauli.
Nivells d'energia.
Configuració electrònica.
Classificació dels elements segons la seva situació en la Taula Periòdica.

III.B. Enllaç químic

- 47 Energia d'enllaç.
Distància d'enllaç.
Angles d'enllaç.
48. Enllaç iònic.
Característiques dels compostos amb enllaç iònic.
Energies reticulars dels cristalls iònics.
Cicle de Born-Haber.
49. Radis iònics.
Números de coordinació.
Estructures cristal·lines més freqüents.
50. Enllaç covalent.
Molècula-ió d'hidrogen.. Molècula de H_2 .
Propietats magnètiques.
Notació convencional de Lewis.
51. Enllaç covalent amb caràcter iònic.
Moment dipolar.
52. Teoria de l'enllaç de valència (V.B.)
Hibridació d'orbitalis atòmics.
Geometries i angles d'enllaç.
53. Teoria dels orbitalis moleculars (MO)
Molècules diatòmiques homonuclears amb orbitalis atòmics de valència s.
54. Molècules diatòmiques homonuclears amb orbitalis atòmics de valència s i p.
Diagrama de nivells energètics dels MO.
55. Molècules diatòmiques heteronuclears.
La molècula de HF.
Molècules del tipus AB.

56. Enllaços en molècules poliatòmiques.
Mètode de VB i de MO per a la molècula BeH_2 .
57. Mètode de VB per a molècules poliatòmiques amb electrons de valència s i p.
Mètode del VB per a molècules poliatòmiques amb electrons de valència s, p i d.
58. MO localitzats. Enllaços dobles i triples.
Longitud i energia d'enllaç. Geometria.
MO deslocalitzats: C_6H_6 .
Concepte de resonància.
59. Enllaç metàl·lic. Característiques.
Estructures dels sòlids metàl·lics.

IV. QUÍMICA INORGÀNICA DESCRIPTIVA

60. Propietats periòdiques.
Conductivitat i estructura.
Potencial de ionització: Afinitat electrònica.
Electronegativitat.
Radi atòmic.
61. Estats d'oxidació.
Oxids.
Hidrurs.
62. Química Inorgànica Industrial.
Acids.
Bases.
Metal·lurgia

V. QUÍMICA DEL CARBONI

63. Alcans i cicloalcans.
Alquens. Estereoïsomeria geomètrica.
L'acetilè.
Grups funcionals. Isomeria.
64. Olefines.
Reaccions d'adició i oxidació.
65. Alcoholos. Noms i propietats.
Reaccions de substitució, eliminació i oxidació.
66. Amines. Propietats.
Halurs d'alquil. Reactius de Grignard.

67. Compostos carbonílics: aldehids i cetones.
Reaccions d'adició-eliminació.
Reaccions d'oxidació-reducció.
Reaccions amb reactius de Grignard.
Condensacions.
68. Àcids. Noms i propietats.
Esters i grases.
69. Concepte d'aromaticitat. Bencè. Reaccions de substitució.
70. Química Orgànica Industrial.
Carbó i hidrocarburs.
Polímers.

BIBLIOGRAFIA

- Química. Curso Universitario.
B.Mahan.
Fondo Educativo Interamericano.
- Principios de Química.
Dickerson-Gray-Haight.
Ed. Reverte.
- Química General.
Becker-Wentworth.
Ed. Reverte.
- Química Razonada.
Pimentel-Spratley.
Ed. Reverte.
- Química General e Inorgánica.
R.Christen.
Ed. Reverte.
- Principios Básicos de Química.
H.B.Gray-Haight.
Ed. Reverte.
- Química General.
J.Castells.
Alhambra Universidad.
- Química General.
M.Garric.
Ed. Reverte.
- Equilibrio Químico.
J.Bard.
Ed.del Castillo
- Termodinámica para químicos.
B.K.Mahan.
Ed. Reverte.
- Enlaces Químicos.
A.L.Companion.
Ed. Reverte.
- Problemas de Química General.
Nyman i King.
Ed. AC.

- Química General (Teoría y 385 problemas resueltos).
J.L.Rosemberg.
Ed. Schaum McGraw-Hill.
- Problemas de Química.
I.S.Butler y A.E.Grosser.
Serie Reverté de Problemas.
- Problemas de Química.
H.O.Daley y R.F.O'Malley.
Serie Reverté de Problemas.
- Problemas de Química General.
M.Lleonart y J.Miró.
Ed. Bellaterra.
- Formulación y nomenclatura Química Inorgánica.
W.R.Peterson.
EUNIBAR.
- Formulación y nomenclatura Química Orgánica.
W.R.Peterson.
EUNIBAR.

Professor: Dr. Bartroli
curs : T. Flor

curs : 1983-84

Vist i plau,

Signat:

Cap de Departament

Data: