

### 1. Introducció

La Química: ciència experimental.- Mesura de les magnituds experimentals. Sistemes d'unitats.- Mescla i substància pura.- Compost i element.

### 2. Les substàncies i les reaccions. Atoms. Molècules. Ions

Reacció química: lleis.- Equivalent químic.- Teoria atòmica de Dalton. Principi d'Avogadro. Atoms i molècules.- Concepte de mol.- Pesos atòmics i moleculars: determinació.- Equacions químiques.- Naturalesa elèctrica de la matèria: ions.

### 3. Estats d'agregació de la matèria

Estat gasós.- Equació d'estat d'un gas ideal.- Mescla de gasos.- Teoria cinètica dels gasos. Velocitats i energies moleculars.- Gasos reals: equació d'estat.- Estat líquid.- Pressió de vapor d'un líquid; variació amb la temperatura.- Estat sòlid.- Sistemes gas-líquid-sòlid: diagrama d'equilibri de fases. Regla de les fases.

### 4. Sistemes dispersos. Dissolucions

Dissolucions: tipus.- Concentració: unitats.- Dissolució de gas en líquid. Influència de la pressió i de la temperatura.- Dissolució de líquid en líquid. Llei de Raoult.- Diagrames d'equilibri líquid-vapor.- Destil·lació.- Líquids immiscibles. Repartició.- Dissolucions de sòlids en líquids. Propietats coligatives.

### 5. Energètica de les reaccions químiques

Sistema termodinàmic: energia interna.- Primer principi de la termodinàmica.- Entalpia.- Reaccions químiques a pressió constant i a volum constant.- Entalpies de formació i de reacció. Energies d'enllaç.- Capacitat calorífica.- Variació de l'entalpia de reacció amb la temperatura.

### 6. Espontaneïtat de les reaccions i magnituds termodinàmiques

Segon principi de la termodinàmica. Entropia.- Energia lliure ( $\Delta G$ ).- Variació de l'energia lliure amb la temperatura.- Criteri d'espontaneïtat en una reacció segons la variació de l'energia lliure.

### 7. Equilibri químic

Reaccions reversibles.- Equilibri i constant d'equilibri en reaccions gasoses.- Constant d'equilibri i energia lliure ( $\Delta G$ ).- Magnituds que determinen una variació en el punt d'equilibri.- Variables que modifiquen la constant d'equilibri.- Equilibris heterogenis.

## 8. Electròlits. Equilibri iònic

Concepte d'electròlit.- Conductivitat de les dissolucions iòniques. Teoria d'Arrhenius i teoria de Debye-Huckel.- Concepte d'activitat.- Equilibri iònic. Producte de solubilitat.- Reaccions de precipitació en l'anàlisi química.

## 9. Àcids i bases. Equilibri de protòlisi

Concepte d'àcid i base segons Brønsted i Lovry i segons Lewis.- Equilibri de protòlisi:  $pK$ .- Producte iònic de l'aigua:  $pH$ .- Indicadors.- Protòlisi de les sals: tipus.- Dissolucions reguladores (tampons).

## 10. Oxidació-reducció. Electroquímica. Piles

Concepte d'oxidació-reducció. Parelles redox.- Reaccions redox.- Piles voltaiques.- F.E.M. d'una pila. Relació entre  $\Delta G$  i la constant d'equilibri.- Potencial d'elèctrode. Potencial normal.- Elèctrode de referència.- Piles de concentració.- Mesura electromètrica del  $pH$ .- Piles de combustible.- Corrosió dels metalls.

## 11. Cinètica de les reaccions

Velocitat de reacció. Factors que la determinen.- Constant específica de velocitat.- Influència de la temperatura sobre la velocitat. Energia d'activació.- Mecanisme de reacció.- Catàlisi: homogènia i heterogènia.- Catàlisi enzimàtica.

## 12. Estructura atòmica

Partícules subatòmiques.- Nucli i embolcall electrònic.- Fonaments experimentals de la teoria quàntica.- Àtom d'hidrogen. Model de Bohr.- Teoria quàntico-ondulatória. Model d'orbitals.- Estructura dels àtoms polieletrònics. Principi de Pauli.- Diagrames d'orbitals. Regla de Hund.- Configuració electrònica dels àtoms.

## 13. L'enllaç químic

Enllaç covalent: teories.- Estudi de les molècules diatòmiques segons la teoria dels orbitals moleculars.- Molècules poliatòmiques. Hibridació.- L'enllaç en els líquids i en els sòlids. Enllaç iònic, enllaç metàl·lic, enllaç d'hidrogen, enllaç per altres interaccions.

## 14. La taula periòdica i les propietats dels elements

Estructura de la taula periòdica.- Relacions verticals i horitzontals: correlació segons la configuració electrònica.- Propietats atòmiques i la seva variació: radi atòmic i radi iònic.- Electronegativitat. Caràcter metàl·lic i no metàl·lic.- Prediccions segons la taula periòdica. Comportament químic.

**15. La química d'alguns elements representatius**

Metalls alcalins (grup Ia).- Sodi: hidròxid i carbonat.- Grup IIa. Calci. Calç, guix i ciment.- Grup IIIa. Alumini.- Grup IVa. Silici: vidres.- Grup Va. Nitrògen: amoniac i àcid nítric. Fòsfor. Fertilitzants.- Grup VIa. Sofre: àcid sulfúric.- Grup VIIa. Clor.- Metalls de transició. Estudi resumit del diferents mètodes d'obtenció i , en particular, estudi del ferro.- Ions complexes: estructura, càrrega i geometria.

**16. La química i el medi ambient**

L'atmosfera. Contaminants.- Aigua. Duresa. Mètodes d'eliminació de la duresa.- Dessalatge.- Contaminants de l'aigua.- Deixalles.- Pesticides.

**17. Química Orgànica. Alcans**

Naturalesa dels compostos orgànics. Enllaç i geometria.- Fórmula empírica i estructural. Isomeria funcional. Funcions orgàniques.- Alcans: estructura i nomenclatura.- Obtenció.- Propietats físiques i químiques.- Cicloalcans.

**18. Alquens i alquins**

Doble i triple enllaç carboni-carboni.- Isomeria geomètrica (cis-trans).- Alquens.- Obtenció.- Reaccions d'addició. Mecanisme. Alquins.

**19. Hidrocarburs aromàtics**

Benzé.- Constitució.- Derivats del benzé.- Mecanisme de la substitució aromàtica. Influència dels grups i efecte orientador.- Hidrocarburs aromàtics policíclics.

**20. Alcohols**

Estructura.- Propietats físiques.- Propietats químiques i reaccions.- Reaccions de substitució nucleofíliques.- Reaccions d'eliminació.- Oxidació dels alcohols.- Síntesi.- Alcohols individuals importants.- Polialcohols.- Fenols.

**21. Organohalogenats. Eters. Amines. Mercaptans**

Compostos organohalogenats.- Síntesi.- Reaccions de substitució i d'eliminació.- Eters: estructura i síntesi.- Propietats.- Amines.- Estructura i propietats.- Basicitat. Sals.- Mercaptans.

**22. Aldehids i cetones**

Grup carbonil.- Reaccions d'addició i de substitució.- Reaccions en posició  $\alpha$  : condensació aldòlica.- Aldehids: obtenció i propietats. Oxidació.- Hemiacetals i acetals.- Cetones.- Quinones.

**23. Àcids carboxílics i derivats**

Àcids carboxílics. Propietats.- Reaccions.- Àcids policarboxílics.- Àcids no saturats.- Àcids aromàtics.- Derivats dels àcids: clorurs, anhídrids, esters, amides. Polimers.

#### 24. Isomeria òptica

Simetria i asimetria molecular.- Isomeria òptica.- Correlacions i convencions. Designació de la quiralitat.- Compostos amb més d'un centre quiral.

#### 25. Hidrats de carboni.

Classificació.- Monosacàrids. Configuració.- Pentoses i hexoses.- Estudi particular de la glucosa.- Disacàrids.- Polisacàrids.

#### 26. Aminoàcids. Proteïnes

Aminoàcids.- Classificació.- Propietats químiques.- Proteïnes.- Estructura i seqüències.

#### 27. Energia per la vida. Bioenergètica

Fosfats orgànics.- Fosfats i relacions d'energia lliure.- Fosfats d'alta energia. ATP.- Oxidació en el cos humà.- Nucleòtids.- Citocroms.- Fosforilació oxidativa. Cicles.

### BIBLIOGRAFIA

#### Química General

W.L. MASTERTON i E.J. SLOWINSKI, *Química General Superior*, 4a ed., Ed. Interamericana, 1980.

H.B. GRAY i G.P. HAIGHT, *Principios básicos de Química*, Ed. Reverté, 1969.

B.H. MAHAN, *Química. Curso Universitario*, Fondo Educativo Interamericano, 1968.

J. CASTELLS, *Química General*, Ed. Alhambra, 1981.

H.H. SISLER, R.D. DRESDE i W.T. MOONEY, *Chemistry, a systematic approach*, Oxford University Press, 1980.

#### Química Orgànica

G.A. TAYLOR, *Química Orgànica*, 2a ed., Ed. Alhambra, 1980.

J.R. HOLUM, *Fisicoquímica, Química Orgànica y Bioquímica*, Ed. Limusa-Wiley, 1971.

#### Formulació

W.R. PETERSON, *Formulación y nomenclatura. Química Inorgànica y Orgànica*, EUNIBAR.

#### Problemes

M. LLEONART i J. MIRO, *Problemas de Química General*, Bellaterra.

J.M. HERNANDO, *Problemas de Química General*, Valladolid.