

TEMA 1. Conceptes bàsics

La Química: objectius. Elements i compostos. Àtoms i molècules: símbols i fórmules. Expressió de la concentració de les dissolucions.

TEMA 2. Termodinàmica química

Primer principi de la Termodinàmica: conservació de l'energia. Energies i entalpies estàndard de reacció. L'espontaneïtat dels processos. Entropia: balanç entròpic de l'univers d'una reacció. Energia lliure de Gibbs. La constant d'equilibri. Reversibilitat de les reaccions

TEMA 3. L'enllaç químic

Enllaç iònic. Propietats dels compostos iònics. Energia d'ionització, afinitat electrònica i electronegativitat. Enllaç covalent: teoria de l'enllaç de valència i teoria d'orbitals moleculars. Ressonància. Teoria de la repulsió dels parells electrònics de la capa de valència. Enllaços febles: interaccions dipol-dipol; enllaços de Van der Waals; enllaç d'hidrògen.

TEMA 4. Cinètica química

Velocitat de reacció; factors qu'influeixen. Ordre de reacció. Teoria de l'estat de transició. Significat de la coordenada de reacció. Catàlisi.

TEMA 5. Reaccions químiques en dissolució aquosa

Concepte d'àcid i base. Constant d'ionització. Ionització de l'H₂O. Concepte de pH. Dissolucions amortidores. Àcids polipròtics. Equilibri àcid-base a la sang.

TEMA 6. Reaccions d'oxidació-reducció

Estats d'oxidació. Equilibris redox en dissolució aquosa. Oxidants i reductors. Relacions entre ϵ° , G° i K_{eq} ; equació de Nernst. Transferència electrònica a sistemes biològics.

TEMA 7. Introducció a la química orgànica

Concatenació de l'àtom de carboni. Control cinètic i termodinàmic de les reaccions orgàniques. Enllaços del carboni: senzills i múltiples. Classificació dels compostos orgànics: grups funcionals. Isomeria estructural o constitucional.

TEMA 8. Hidrocarburs

Nomenclatura. Propietats físiques i químiques. Conformació dels alcans. Hidrocarburs insaturats. Reaccions. Polimerització. Isomeria cis-trans

TEMA 9. Estereoquímica

Constitució, configuració i conformació. Compostos quirals. Activitat òptica. Enantioisomeria. Diastereoisomeria. Compostos quirals i sistemes vius.

TEMA 10. Halurs d'alquil. Alcohols, fenols, èters i tiols

Halurs d'alquil. Reaccions dels halurs d'alquil. Classificació dels alcohols. Reaccions dels Alcohols. Oxidació dels alcohols als éssers vius. Fenols. Eters. Tiols. Reactivitat dels tiols.

TEMA 11. Aldehids i cetones

Estructura i reactivitat del grup carbonil. Oxidació i reducció del grup carbonil. Reaccions d'addició nucleòfila. Condensació aldòlica. Reaccions del grup carbonil "in vivo". Aldehids i cetones, insaturats; quinones.

TEMA 12. Àcids carboxílics i derivats

Estructura electrònica i caràcter àcid. Nomenclatura d'àcids, èsters, tioèsters i anhídrids. Propietats dels àcids carboxílics i els seus derivats. Síntesi i hidròlisi d'èsters als éssers vius. Reaccions de transferència d'acil. Mecanismes de reacció dels àcids carboxílics i els seus derivats. L'àcid fosfòric i els seus derivats.

TEMA 13. Compostos orgànics nitrogenats

Amines: estructura electrònica i basicitat. Reactivitat. Ions amoni substituïts. Síntesi d'amines als éssers vius. Àmides: característiques de l'enllaç amida.

TEMA 14. Compostos aromàtics i heterocíclics aromàtics

El benzé: estructura electrònica, ressonància, aromaticitat. Aromaticitat en sistemes heterocíclics. Pirrole, furan. Sistemes heterocíclics fusionats: purines i pirimidines.

BIBLIOGRAFIA

General:

- | | |
|-------------------------------|--|
| G.H. Schmid | Química Biológica. Ed. Interamericana, 1986. |
| J.B. Russell y A. Larena | Química. McGraw Hill, 1990. |
| J. Castells | Química General y Bioorgánica. Edit. Alhambra, 1981. |
| H. Hart, D. Hart, L.E. Craine | Química Orgánica. Edit. McGraw Hill, 1995. |
| Josep Sañá V. | Química per a les ciències de la naturalesa y de l'alimentació
Ed. Vicens Vives, 1993 |
| C.E. Mortimer | Química. Grupo Editorial Iberoamericano, 1983. |

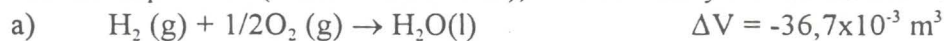
Ampliació:

B.H. Mahan
N.L. Allinger
T.W.C. Solomons
K.P.C. Vollhardt

Química: Curso Universitario. 4^a ed. Edit. Addison-Wesley, 1990.
Química Orgánica. 2^a ed. Edit. Reverté, 1983.
Química Orgánica. Edit. Limusa, 1982.
Organic Chemistry. Edit. W.H. Freeman & Co., 1987.

TERMODINÁMICA QUÍMICA

- 1- Utilizando los datos de entalpías estándar de formación y los suministrados en las siguientes ecuaciones termoquímicas (realizadas a 298 K), calcular ΔH° y ΔE° de las mismas.



(1 Atm L = 101,24 J)

$\Delta H_f^\circ(\text{NO}_2) = +33,2 \text{ kJ/mol}$

$\Delta H_f^\circ(\text{N}_2\text{O}_4) = +9,16 \text{ kJ/mol}$

R: a) $\Delta H^\circ = -285,9 \text{ kJ/mol}$ $\Delta E^\circ = -282,18 \text{ kJ/mol}$

a) $\Delta H^\circ = -57,24 \text{ kJ/mol}$ $\Delta E^\circ = -54,76 \text{ kJ/mol}$

- 2- Utilizando las tablas de energías de enlace, calcular ΔH° para la primera reacción del problema anterior. Comparar ambos resultados.

R: a) $\Delta H^\circ = -245,5 \text{ kJ/mol}$

- 3- Considerar los siguientes datos para el yodo:

	$\Delta H_f^\circ (\text{kJ/mol})$	$\Delta G_f^\circ (\text{kJ/mol})$	$S^\circ (\text{J/mol}\cdot\text{K})$
$\text{I}_2(\text{s})$	0,0	0,0	116,3
$\text{I}_2(\text{g})$	62,43	19,37	260,7

a) ¿Cuál es el estado estándar del yodo?

b) ¿Cuál es el valor del calor molar de sublimación del yodo?

c) ¿Cuál es el valor de la energía libre molar de sublimación del yodo?

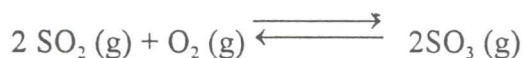
d) Explicar la diferencia existente entre los valores hallados en b) y c).

e) ¿A qué temperatura sería $\Delta G_f^\circ = 0$ para el yodo gaseoso?

R: a) $\text{I}_2(\text{s})$ b) $\Delta H^\circ_{\text{subl}} = 62,43 \text{ kJ/mol}$ c) $\Delta G^\circ_{\text{subl}} = 19,37 \text{ kJ/mol}$

e) $T = 433,54 \text{ K}$

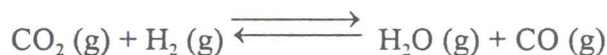
- 4- Se encontró que la mezcla en equilibrio



Situada en un recipiente de un litro, a una determinada temperatura, contenía 0,12 mol de SO_3 , 0,05 mol de O_2 y 0,11 mol de SO_2 . Otro recipiente de un litro contiene 64 g de SO_2 a la misma temperatura. ¿Qué cantidad (en peso) de O_2 debemos añadir a este recipiente para que, en el equilibrio, la mitad de SO_2 se haya oxidado a SO_3 ?

R: a) $K_{\text{eq}} = 23,8 \text{ L/mol}$ b) 9,34 g O_2

- 5- Los gases de la mezcla en equilibrio



situada en un recipiente de 6 litros a 1007 °C, presentan las siguientes presiones parciales; $\text{CO}_2 = 63,1 \text{ atm}$, $\text{H}_2 = 21,1 \text{ atm}$, $\text{H}_2\text{O} = 31,6 \text{ atm}$ y $\text{CO} = 84,2 \text{ atm}$. Se extrae de la mezcla suficiente cantidad de CO_2 como para reducir la presión parcial de CO a 63,0 atm en el equilibrio, manteniendo la temperatura constante.

a) Calcular la presión parcial de CO_2 en el nuevo sistema en equilibrio.

b) Comparar los valores de K_p y K_c para la reacción indicada.