

Programa de Química per a la llicenciatura de Física (6 crèdits 4.5T+1.5pp)**1 Equilibri àcid-base**

Conceptes generals d'equilibri químic. Teoria de Bronsted-Lowry. Autoionització de l'aigua. Constant d'acidesa i basicitat. Concepte de pH. Càlcul de pH d'àcids i bases. Àcids polipròtids. Hidròlisi de sals. Dissolució tampó. Capacitat tampó. Indicadors àcid-base. Valoracions àcid-base. (5)

2 Equilibris de complexació i precipitació

Sals solubles i insolubles. Constant de producte de solubilitat. Càlcul de la solubilitat d'una sal. Efecte d'ió comú. Efecte de la força iònica. Solubilitat i acidesa. Condició de precipitació d'una sal. Precipitació fraccionada. Constant de formació d'un complex. Solubilitat i complexació. Valoracions. (4)

3 Equilibris d'oxidació-reducció

Estats d'oxidació. Reaccions redox. Oxidants i reductors. Piles electroquímiques. Força electromotriu d'una pila. Potencial normal de reducció. Equació de Nernst. Valoracions redox. (5)

4. Lleis fonamentals de la cinètica química

Equació de velocitat d'una reacció química. Ordre d'una reacció química. Equacions diferencials i integrades de la velocitat. Determinació experimental de la velocitat d'una reacció química. Mecanismes de reacció. Reacció elemental reversible. Aproximació de l'estat de transició. Aproximació de l'etapa determinant. (4)

5. Cinètica molecular

Llei d'Arrhenius. Teoria de les col·lisions. Superfícies d'energia potencial. Teoria del complex activat. (2)

6. Estructura atòmica i propietats dels elements

Concepte d'orbital atòmic. Representació d'orbitals. Aproximació dels electrons independents. Regla de Hund. Orbitals i nivells d'energia. Apantallament dels electrons i càrrega nuclear efectiva. Configuracions electròniques. Excepcions a la regla d'Aufbau. Propietats atòmiques periòdiques: Energia d'ionització. Afinitat electrònica. Electronegativitat. Radis atòmics. (5)

7. Enllaç covalent

Estructures de Lewis. Concepte de resonància. Teoria de la repulsió dels parells electrònics: predicció de la geometria molecular. Teoria de l'enllaç de valència. Orbitals híbrids s i p. El model dels orbitals moleculars. Energia i recobriments. La molècula d'hidrogen. Polaritat de l'enllaç i moment dipolar. Orbitals moleculars π en compostos orgànics. (4)

8. Enllaç iònic i altres tipus d'enllaç

Sòlids iònics. Radis iònics. Enllaç iònic. Energia reticular. Cicle de Born-Haber. Propietats físiques dependents de l'energia reticular. Sòlids covalents: estructures mono, bi i tridimensionals. Sòlids moleculars. Enllaç d'hidrogen. Forces de Van der Waals. (4)

9. Propietats químiques generals dels elements

Propietats químiques dels òxids. Propietats químiques dels hidrurs. (3)

10. Propietats químiques generals dels grups funcionals

Hidrocarburs saturats i no saturats. Alcohols i derivats. Grup carbonil i derivats.

Bibliografia recomenada

- GILLESPIE R.J., HUMPHREYS D.A., BAIRD N.C., ROBINSON R.J., *Química*. Ed. Reverté. Barcelona 1990 (2 vols)
- MAHAN B.H., MAYERS R.J. *Química*, Ed. Addison-Wesley Iberoamericana. Wilmington 1990
- CENTELLES F., BRILLAS E., DOMÈNECH X., BASTIDA R.M., *Fonaments de estructura atòmica i de l'enllaç químic*. Publicacions Universitat de Barcelona. Barcanova. Barcelona 1992
- CENTELLES F., BRILLAS E., DOMÈNECH X., BASTIDA R.M., *Fonaments de termodinàmica, electroquímica i cinètica*. Publicacions Universitat de Barcelona. Barcanova. Barcelona 1992
- AVERY H.E. *Cinètica química bàsica y mecanismos de reacció* Ed. Reverté. Barcelona 1977