

Prof. Mercè Capdevila (C7/310)

1 EQUILIBRI QUÍMIC

La constant d'equilibri. Variació de la constant d'equilibri amb la temperatura. Factors que afecten l'equilibri: Principi de Le Chatelier.

1.1 EQUILIBRIS ÀCID-BASE

Definició d'àcids i bases d'Arrhenius. Teoria de Brønsted i Lowry. Àcids i bases de Lewis. Força dels àcids i les bases. Autoionització de l'aigua i escala de pH. Càlcul del pH d'àcids i bases. Àcids polipròtics. Dissolucions amortidores. Hidròlisi de les sals. Mesura del pH: Indicadors. Valoracions àcid-base.

1.2 EQUILIBRIS DE SOLUBILITAT I COMPLEXACIÓ

Solubilitat i precipitació de sals. Producte de solubilitat. Càlcul de la solubilitat d'una sal. Efecte d'ions comuns. Solubilitat i pH. Solubilitat i complexació: Equilibris de complexació.

1.3 EQUILIBRIS D'OXIDACIÓ-REDUCCIÓ

Estats d'oxidació. Igualació de reaccions redox. Piles electroquímiques. Força electromotriu d'una pila. Potencial estàndard de reducció: sèrie electroquímica. Equació de Nernst. Valoracions redox.

2 CINÈTICA

Velocitat de les reaccions químiques. Equació de velocitat: lleis diferencials i integrades de velocitat. Determinació experimental de l'equació de velocitat. Mecanismes de reacció. Etapes elementals. Mecanismes i lleis de velocitat: Aproximacions de l'etapa determinant i de l'estat estacionari. Dependència de la constant de velocitat amb la temperatura. Teoria de les col·lisions. Catalisi.

3 ESTRUCTURA ATÒMICA I TAULA PERIÒDICA

Concepte d'orbital atòmic. Representació d'orbitals. Àtoms polieletrònics. Orbitals i nivells d'energia. Apantallament i càrrega nuclear efectiva. Regla d'Aufbau. Principi d'exclusió de Pauli. Regla de Hund. Taula Periòdica i configuracions electròniques. Propietats atòmiques periòdiques: radi atòmic, energia d'ionització, afinitat electrònica, electronegativitat.

4 L'ENLLAÇ QUÍMIC

L'estructura electrònica dels àtoms i l'enllaç químic.

4.1 ENLLAÇ IÒNIC

Enllaç iònic. Energia reticular. Cicle de Born-Haber

4.2 ENLLAÇ COVALENT

Enllaç covalent. Estructures de Lewis. Ressonància. Teoria RPECV: predicció de la geometria molecular. Polaritat i moment dipolar. Teoria de l'enllaç de valència. Orbitals híbrids. Teoria d'orbitals moleculars.

4.3 FORCES INTERMOLECULARS

Forces de van der Waals i Enllaç d'hidrogen.

4.4 SÒLIDS IÒNICS, COVALENTS I MOLECULARS

Sòlids iònics. Sòlids covalents: estructures mono, bi i tridimensionals. Sòlids moleculars.

5 QUÍMICA INORGÀNICA

Propietats i característiques generals dels elements de la Taula Periòdica. Principals compostos.

6 QUÍMICA ORGÀNICA

Hydrocarburs saturats i no saturats. Grups funcionals: alcohols, èters, aldehids, cetones, àcids carboxílics, èsters i amines.

BIBLIOGRAFIA:

Llibre de text:

- * Atkins, P.W., *Química General*, Ed. Omega, 1989

Nomenclatura i formulació:

- * Sales, J.; Vilarrasa, J., *Introducció a la nomenclatura química. Inorgànica i orgànica*, EDUNSA, 1994

Llibres de consulta:

- * Mahan, B.H.; Myers, R.J., *Química, Curso Universitario*, 4ª Ed., Addison-Wesley Iberoamericana, 1990.
- * Brillas, E.; Bastida, R.M.; Centellas, F; Domènech, X., *Fonaments de Termodinàmica, Electroquímica i Cinètica*, Barcanova, 1992.
- * Centellas, F; Brillas, E.; Domènech, X.; Bastida, R.M., *Fonaments d'Estructura Atòmica i de l'Enllaç Químic*, Barcanova, 1992.
- * Casabó, J., *Estructura Atòmica y Enlace Químico*, Ed. Reverté, 1997.
- * Bailar, J.C.; Moeller, T.; Kleinberg, J.; Guss, C.O.; Castellion, M.E.; Metz, C.; *Chemistry*, Harcourt Brace Jovanovich Publishers, 1989. (Edició Espanyola de Vicens-Vives, 1983)
- * P.W. Atkins, *The Elements of Physical Chemistry*, Oxford University Press, 1996