

Llicenciatura **CIÈNCIES AMBIENTALS**

Assignatura **QUÍMICA**

Curs **2004-2005**

Programa

1. ESTRUCTURA ELECTRÒNICA DELS ÀTOMS
Antecedents històrics. Mecànica quàntica; ones i partícules. L'àtom d'hidrogen. Concepte d'orbital atòmic; representació dels orbitals. Funció de spin.
2. ÀTOMS POLIELECTRÒNICS.
Principi d'exclusió de Pauling. Regla de Hund. Orbitals i nivells d'energia. Apantallament dels electrons i càrrega nuclear efectiva. Configuracions electròniques; Excepcions.
3. LA TAULA PERIÒDICA
Ordenació dels elements. Classificació dels elements; grups, períodes, blocs, caràcter metàl·lic. Propietats periòdiques dels elements; volum i radi atòmics, potencial d'ionització, afinitat electrònica. Propietats dels àtoms enllaçats; estat d'oxidació i electronegativitat.
4. GENERALITATS DEL ENLLAÇ QUÍMIC.
Tipus de substàncies. Models d'enllaç. Paràmetres energètics i estructurals.
5. L'ENLLAÇ EN LES MOLECULES
Model de l'enllaç de valència; estructures de Lewis; teoria de la repulsió dels parells electrònics de la capa de valència. Teoria de l'enllaç de valència; hibridació: el cas del metà, età, etilè i acetilè. Model dels orbitals moleculars.
6. QUÍMICA DEL CARBONI (I)
Particularitat del Carboni. Hidrocarburs alifàtics i aromàtics; derivats halogenats i reactivitat. Alcohols, èters i tiols. El grup carbonil; cetones i aldehids. El grup carboxil; àcids i derivats. El grup amino i derivats.
7. QUÍMICA DEL CARBONI (II)
Compostos orgànics i toxicitat. Pesticides, insecticides i herbicides. Bifenils policlorats (PCB's). Hidrocarburs aromàtics polinuclears (PAH's).
8. L'ENLLAÇ EN ELS SÒLIDS (I)
Els metalls; estructures i propietats. Sòlids iònics; estructures i propietats. Enllaç iònic; consideracions termodinàmiques, energia reticular.
9. L'ENLLAÇ EN ELS SÒLIDS (II)
Sòlids covalents; estructures i propietats. Sòlids moleculars; forces de Van der Waals, enllaç per pont d'hidrogen.
10. ELS ELEMENTS DELS GRUPS PRINCIPALS:
Elements; estructura, estats d'oxidació i energies d'enllaç. Compostos: halurs, òxids i hidrurs. Metalls pesants i química del sòl.

Llibres recomanats

Temes 1-5, 8 i 9

- *Estructura atòmica i enlace químico*. J. Casabó Ed. Reverté
- *Fonaments d'estructura atòmica i enllaç químic* F. Centelles, E. Brillas, X. Domènech, R. M. Bastida. Edicions de la UB (en impremta, 2004)
- *Cálculos básicos en estructura atómica i molecular* M. Paraira, J. J. Pérez. Ed. Vicens-Vives.

Temes 6 i 7:

- *Introducción a la nomenclatura química inorgánica i orgánica*. Joaquim Sales, Jaume Vilarrassa; Ed. Reverté (2003)
- *Química Ambiental*. C. Baird. Ed. Reverté (2001)

General:

- *Química. Curso Universitario*. H. Mahan Addison Wesley, 4ª Edició (1990)

Professors de teoria: Grup 1 aula C3-020: Roger Bofill (Torre Química, 3ª planta, despatx C7-329) c/e: Roger.Bofill@uab.es
Grup 2 aula C3B-103: Jordi Bartrolí (Torre Química, 2ª planta, despatx C7-247) c/e: jordi.bartroli@uab.es

Professors de problemes: Grup 1 aula C3-020: Anna Pañella (Torre de Química, 3ª planta, porta C7-357)
Grup 2 aula C3B-103: Cristina Rodríguez (Torre de Química, 3ª planta, porta C7-319)
Grup 3 aula C3B-006: Professor per determinar