

Química (Licenciatura de CC.AA.) CURS 2008-9

1. ESTRUCTURA ELECTRÒNICA DELS ÀTOMS
Antecedents històrics. Mecànica quàntica: ones i partícules. L'àtom d'hidrogen. Concepte d'orbital atòmic i representació dels orbitals. Funció de spin.
2. ÀTOMS POLIELECTRÒNICS
Principi d'exclusió de Pauli. Regla de Hund. Orbitals i nivells d'energia. Apantallament dels electrons i càrrega nuclear efectiva. Configuracions electròniques.
3. LA TAULA PERIÒDICA
Ordenació dels elements. Classificació dels elements: grups, períodes, blocs, caràcter metàl·lic i estat físic. Propietats periòdiques dels elements: radi atòmic, radi iònic, potencial d'ionització, afinitat electrònica i caràcter metàl·lic. Propietats dels àtoms enllaçats: estat d'oxidació i electronegativitat.
4. GENERALITATS DE L'ENLLAÇ QUÍMIC
Tipus de substàncies. Models d'enllaç. Paràmetres energètics i estructurals.
5. L'ENLLAÇ EN LES MOLÈCULES
L'enllaç per parells d'electrons: estructures de Lewis-Langmuir. Teoria de la repulsió dels parells electrònics de la capa de valència (TRPECV). Model de l'enllaç de valència (TEV). Polaritat de les molècules. Hibridació: el cas del metà, età, etilè i acetilè.
6. QUÍMICA DEL CARBONI (I)
Orígens de la Química Orgànica i els cicles de la natura. Alteracions dels cicles a causa de la química sintètica. La problemàtica del clor i els contaminants orgànics persistents (COPs). Particularitat del carboni. Hidrocarburs alifàtics i aromàtics: derivats halogenats i reactivitat. Alcohols, èters i tiols. El grup carbonil: aldehids i cetones. El grup carboxil: àcids i derivats. El grup amino i derivats.
7. QUÍMICA DEL CARBONI (II)
Compostos orgànics i toxicitat. Pesticides: insecticides, herbicides i fungicides. Fonts de dioxines. Bifenils policlorats (PCBs) i dibenzofurans policlorats (PCDFs). Hidrocarburs aromàtics polinuclears (PAHs).
8. L'ENLLAÇ EN ELS SÒLIDS
Els metalls: estructures i propietats. Sòlids iònics: estructures i propietats. Enllaç iònic: consideracions termodinàmiques, energia reticular. Sòlids covalents: estructures i propietats. Sòlids moleculars: forces de van der Waals, enllaç d'hidrogen.
9. METALLS PESANTS I QUÍMICA DEL SÒL
Problemàtica mediambiental deguda als metalls pesants. Formes tòxiques conegudes i efectes sobre la salut humana i el medi natural. El paper del sòl en la química dels metalls pesants.

Metodologia

Els alumnes disposaran d'apunts per a les sessions de teoria. Es faran diverses sessions tutoritzades amb la participació del professor de teoria i un professor de problemes. Durant aquestes sessions es proposarà als alumnes de resoldre problemes d'exàmens d'altres anys en grup. Hi haurà també un llistat de problemes amb les solucions respectives.

També es farà ús del campus virtual, on s'hi penjaran preguntes d'autoavaluació amb les respostes corresponents i petits programes informàtics que ajudaran a entendre els conceptes exposats a classe. També es proporcionaran als alumnes adreces web útils i complementàries per al seu aprenentatge.

Avaluació

L'avaluació de l'alumne es basarà en dos exàmens (un examen parcial optatiu i un examen final obligatori) i si és el cas també un seminari optatiu i un qüestionari optatiu sobre els seminaris.

Examen parcial: L'examen parcial serà el dia 4 de novembre de 2008 a l'hora de classe de teoria (50 min de durada). Aquest examen és optatiu i versarà sobre els Temes 1 a 3. El pes d'aquest examen en el global de l'assignatura serà del 30% en el cas que el parcial s'aprovi amb una nota més alta que l'examen final (en el cas que es suspengui el parcial o bé que s'aprovi amb una nota inferior a la del final no es tindrà en compte aquest examen en la qualificació final). Encara que s'aprovi, l'examen parcial no allibera matèria.

Seminaris optatius i qüestionari sobre els seminaris: En el decurs dels Temes 7 i 9 hi ha la possibilitat que grups de voluntaris de 3 persones facin un treball relacionat amb el temari per tal que l'exposin a classe (presentacions de 10-15 min.). Aquest treball pot permetre millorar la qualificació final de l'assignatura (es multiplicarà la nota final de l'assignatura per un coeficient que podrà anar de 1.00 a 1.10 a criteri del professor). No obstant, només s'aplicarà aquest increment de qualificació en el cas que l'alumne hagi superat l'assignatura (nota global de 5.0 o superior). La nota serà individual, de manera que persones del mateix grup poden obtenir qualificacions diferents del treball. Per tal de discernir entre alumnes, caldrà que cadascun dels membres del grup que ha fet el treball responguin en públic almenys una qüestió que plantegi el professor i li lliurin per escrit un full DIN A4 amb la seva contribució personal al treball. D'altra banda, els materials elaborats pels alumnes seran penjats al Campus Virtual i podran ser susceptibles de ser preguntats en exàmens o proves posteriors. Els alumnes que ho desitgin, podran respondre un petit qüestionari voluntari de 30 min de durada sobre els seminaris (data prevista de realització: just abans de les vacances de Nadal). La nota obtinguda en aquest qüestionari tindrà un pes del 15% en la nota final i permetrà alliberar matèria en el cas que s'aprovi.

Examen final: L'examen final serà el dia 9 de febrer de 2009 a les 3:30 de la tarda i serà de tres hores de durada. Per poder aprovar l'assignatura cal treure com a mínim una nota igual o superior a 4.5 en l'examen final. Existiran tres possibilitats de quantificar la nota global:

a) Si no s'ha fet cap parcial ni el qüestionari dels seminaris o bé s'han suspès, la nota global és el 100% de la nota de l'examen final. També aquest seria el cas si s'ha aprovat el parcial amb una nota inferior a la nota de l'examen final. Existeix la possibilitat de tornar a contestar les preguntes sobre els seminaris en l'examen final tot i haver aprovat el qüestionari sobre els seminaris, però en aquest cas l'alumne ha d'assumir el risc de poder obtenir una nota més baixa d'aquesta part de l'examen final, que òbviament tindrà un 15% de pes.

b) Si s'ha aprovat el parcial (30% pes) amb una nota superior a l'examen final i no es va contestar el qüestionari sobre els seminaris (o bé es va suspendre), l'examen final tindrà un 70% de pes sobre la nota global.

c) Si s'ha aprovat el parcial (30% pes) amb una nota superior a l'examen final i a més es va aprovar el qüestionari sobre els seminaris (15% pes) i no es vol intentar apujar nota d'aquesta part, l'examen final tindrà un 55% de pes sobre la nota global i no caldrà respondre la part sobre els seminaris.

En qualsevol cas cas, l'assignatura només s'aprovarà si la nota global és igual o superior a 5.0. Aquestes condicions són vàlides també per a la convocatòria de juliol (es guarden totes les notes).

Aquest valor final obtingut caldrà ser multiplicat pel factor 1.00-1.10 en el cas d'haver-se exposat un seminari a classe.

Bibliografia

Temes 1-5, 8:

- *Estructura atòmica y enlace químico.* J. Casabó; Ed. Reverté (1996)
Aquest llibre conté tota la informació bàsica sobre les propietats de l'àtom, dels elements químics, de l'enllaç químic i dels sòlids. Conté exemples i dibuixos molt aclaridors.
- *Fonaments d'estructura atòmica i enllaç químic.* F. Centelles, E. Brillas, X. Domènech, R. M. Bastida; Barcanova, Edicions de la UB (1992)
Aquest llibre permet aprofundir més des d'un punt de vista físic en les propietats de l'àtom i l'estat sòlid. Especialment útil per als temes 1, 2 i 8.
- *Cálculos básicos en estructura atómica y molecular.* M. Paraira, J. J. Pérez; Ed. Vicens-Vives (1988)

Temes 6, 7 i 9:

- *Introducció a la nomenclatura química inorgànica i orgànica (5a edició)* J. Sales, J. Vilarrassa; Ed. Reverté (2003)
Aquest llibre és aconsellable per adquirir els conceptes bàsics de química orgànica que s'explicaran en el tema 6 del curs.
- *Química Ambiental.* C. Baird; Ed. Reverté (2001)
- *Contaminación ambiental. Una visión desde la Química.* Orozco et al. Ed. Thomson Paraninfo
- *Química Ambiental de sistemas terrestres.* X. Domènech, J. Peral; Ed. Reverté (2006)
Aquests llibres són bàsics per entendre els processos químics de la contaminació que s'explicaran en els temes 7 i 9 del curs.

General:

- *Principios esenciales de Química General.* R. Chang; 4a. Ed. McGraw-Hill (2006)
- *Química.* R. Chang; 9a. Ed. McGraw-Hill (2007)

Professors de teoria

Roger Bofill Arasa (Torre Química, 3ª planta, despatx C7-310) c/e: Roger.Bofill@uab.cat

Vicenç Branchadell (Torre Química, 1ª planta, despatx C7-133) c/e: Vicenc.Branchadell@uab.cat