

Química**2012/2013**

Codi: 102828

Crèdits: 9

Titulació	Pla	Tipus	Curs	Semestre
2501915 Graduat en Ciències Ambientals	959 Graduat en Ciències Ambientals	FB	1	2

Professor de contacte

Nom: Xavier Sala Roman

Correu electrònic: Xavier.Sala@uab.cat

Utilització d'idiomes

Llengua vehicular majoritària: català (cat)

Algun grup íntegre en anglès: No

Algun grup íntegre en català: Sí

Algun grup íntegre en espanyol: No

Prerequisits

Tot i que no existeixen prerequisits com a tal, es considerarà que s'han de dominar els coneixements que l'alumne pot aprendre als cursos propedèutics de Química que ofereix la Facultat de Ciències de la Universitat Autònoma de Barcelona:

1. Expressió de la concentració

Concepte de mol. Molaritat (M), molalitat (m), normalitat (N), % en pes o volum, etc.

2. Estequiometria de les reaccions químiques

Càlculs estequiomètrics. Reactiu limitant. Rendiment de la reacció.

3. Conceptes bàsics d'equilibri químic.

Equilibri químic i constant d'equilibri. Expressions de la constant d'equilibri. Factors que afecten l'equilibri.

4. Formulació química

Compostos inorgànics i compostos orgànics.

5. Igualació de reaccions químiques

Reaccions no redox. Conceptes bàsics de reaccions redox. Igualació de reaccions redox.

6. Gasos ideals

Conceptes generals. Llei dels gasos ideals.

Objectius

L'objectiu general de l'assignatura és posar en contacte l'estudiant, per primera vegada als seus estudis de Grau, amb els conceptes fonamentals de la Química. Es pretén que l'estudiant prengui consciència de la importància de la Química en la vida quotidiana i, d'una manera especial, en el medi ambient.

Objectius més concrets de l'assignatura són introduir l'estudiant en el coneixement actual del món molecular (a través de l'estudi de l'Estructura Atòmica i l'Enllaç), a comprendre els fenòmens químics del món macroscòpic, tant els que tenen relació amb l'equilibri (a través de la Termodinàmica), com amb la velocitat

dels processos químics (a través de la Cinètica Química) i una introducció al món dels compostos orgànics, de les biomolècules i de les tècniques d'anàlisi d'aquestes últimes.

Els objectius més específics de l'assignatura són:

- 1) Estudi estructural i molecular de la matèria i el món que ens envolta.
- 2) Interpretació macroscòpica dels fenòmens químics:
 - a. Termodinàmica química: els sistemes químics en equilibri.
 - b. Cinètica química: com tenen lloc els canvis químics i a quina velocitat
- 3) Introducció a les propietats dels compostos orgànics i de les biomolècules.

Competències

- Analitzar i utilitzar la informació de manera crítica.
- Aplicar amb rapidesa els coneixements i habilitats en els diferents camps involucrats en la problemàtica ambiental, i aportar-hi propostes innovadores.
- Aprendre i aplicar els coneixements adquirits a la pràctica i a la resolució de problemes.
- Demostrar iniciativa i adaptar-se a problemes i situacions nous.
- Demostrar interès per la qualitat i la praxi de la qualitat.
- Demostrar un coneixement adequat i utilitzar les eines i els conceptes de les disciplines científiques més rellevants en medi ambient.
- Recollir, analitzar i representar dades i observacions, tant quantitatives com qualitatives, utilitzant de forma segura les tècniques adequades d'aula, de camp i de laboratori.
- Transmetre adequadament la informació, de forma verbal, escrita i gràfica, i utilitzant les noves tecnologies de comunicació i informació.
- Treballar amb autonomia.
- Treballar en equip desenvolupant els valors personals quant al tracte social i al treball en grup.

Resultats d'aprenentatge

1. Analitzar i utilitzar la informació de manera crítica.
2. Anomenar i formular els compostos químics orgànics i inorgànics.
3. Aprendre i aplicar els coneixements adquirits a la pràctica i a la resolució de problemes.
4. Demostrar iniciativa i adaptar-se a problemes i situacions nous.
5. Demostrar interès per la qualitat i la praxi de la qualitat.
6. Descriure el concepte d'equilibri químic i els factors que el poden modificar.
7. Descriure el concepte d'ió complex, la formulació i la nomenclatura.
8. Descriure el concepte de solubilitat i les variables que l'afecten.
9. Descriure els tres principis de la termodinàmica i les funcions termodinàmiques associades.
10. Descriure les propietats dels diferents estats d'agregació de la matèria, i relacionar-les amb l'enllaç químic i les forces intermoleculars.
11. Diferenciar entre els diferents tipus d'enllaç químic i d'interaccions intermoleculars.
12. Identificar el caràcter d'àcid o base de Brønsted dels compostos químics en dissolució.
13. Identificar els paràmetres cinètics d'una reacció química, relacionar-los amb el mecanisme de reacció i descriure'n la dependència amb la temperatura.
14. Identificar els principals grups funcionals orgànics i descriure'n les propietats fisicoquímiques més rellevants.
15. Identificar els processos de reducció i oxidació en una reacció redox i igualar l'equació química corresponent.
16. Identificar els processos químics en l'entorn mediambiental i valorar-los adequadament i originalment.
17. Identificar les principals fonts de bases de dades i bibliogràfiques en l'àmbit de la química.
18. Observar, reconèixer, analitzar, mesurar i representar adequadament i de manera segura processos químics.
19. Transmetre adequadament la informació, de forma verbal, escrita i gràfica, i utilitzant les noves

tecnologies de comunicació i informació.

20. Treballar amb autonomia.

21. Treballar en equip desenvolupant els valors personals quant al tracte social i al treball en grup.

Continguts

BLOC I - ENLLAÇ I ESTRUCTURA DE LA MATÈRIA

1. Els àtoms i la teoria atòmica

Els primers descobriments de la química. Els electrons i altres descobriments de la física atòmica. L'àtom nuclear. Radiació electromagnètica. Teoria quàntica. L'àtom de Bohr. Espectres atòmics. Dualitat ona-partícula i principi d'incertesa. Mecànica ondulatoria: funció d'ona.

2. Àtom d'hidrogen i àtoms polieletrònics

L'àtom d'hidrogen. Concepte d'orbital hidrogenoide. Representació dels orbitals. Spin electrònic. Àtoms polieletrònics. Configuracions electròniques: regles per a la distribució dels electrons en els orbitals.

3. La taula periòdica

Introducció a la taula periòdica. Introducció històrica. Configuració electrònica i taula periòdica. Metalls, no metalls i els seus ions. Propietats periòdiques dels àtoms: radi atòmic i radi iònic. Potencial d'ionització. Afinitat electrònica. Electronegativitat. Altres propietats.

4. Enllaç químic

Estructures de Lewis. Conceptes de ressonància, ordre d'enllaç, càrrega formal i estat d'oxidació. Geometria molecular: teoria de la repulsió de parells electrònics (VSEPR). Ordre d'enllaç i energia d'enllaç. Teoria de l'enllaç de valència: orbitals híbrids. Teoria dels orbitals moleculars. Enllaç metàl·lic: teoria de bandes, metalls, semiconductors i aïllants. Forces intermoleculars: enllaç d'hidrogen, forces de van der Waals. L'enllaç químic com a força intermolecular.

5. Sòlids cristal·lins

Tipus d'estructures cristal·lines. Canvis d'energia en la formació de cristalls iònics: energia reticular, cicle de Born-Fajans-Haber.

BLOC II - TERMODINÀMICA, CINÈTICA I EQUILIBRI

6. Principis de l'equilibri químic

Concepte d'equilibri, expressions i relacions entre les constants d'equilibri. El quocient de reacció Q . Modificacions de les condicions d'equilibri: principi de Le Châtelier. Càlculs d'equilibri: exemples.

7. Termoquímica, espontaneïtat i equilibri

Conceptes bàsics: calor, capacitat calorífica i calor específic. Calor de reacció. Primer principi de la termodinàmica: energia interna, treball i funció d'estat. Entalpia: llei de Hess, entalpia de formació estàndard i entalpia de reacció estàndard. El problema de l'energia: els combustibles. Espontaneïtat. Entropia. Segon principi de la termodinàmica: energia de Gibbs, energia de Gibbs estàndard, relació entre l'energia de Gibbs i la constant d'equilibri; predicció de la direcció d'un canvi químic.

8. Les solucions i les seves propietats

Forces intermoleculars i processos de dissolució: solucions iòniques, solucions saturades i cristallització fraccionada. Solubilitat dels gasos. Pressió de vapor de les solucions. Descens crioscòpic i augment ebulloscòpic de les solucions.

9. Reaccions en solució aquosa

Naturalesa de les solucions aquoses. Reaccions de precipitació. Reaccions àcid-base. Principis generals de les reaccions redox. Càlculs estequiomètrics en solucions aquoses.

10. Equilibri de fases i dissolucions

Condicció d'equilibri de fases. Regla de les fases.- Diagrama de fases d'una substància pura.- Equacions de Clapeyron i de Clausius-Clapeyron.- Dissolucions ideals. Llei de Raoult.- Dissolucions diluïdes. Llei de Henry.- Propietats col·ligatives.

11. Introducció a la cinètica química

Velocitat d'una reacció química. Equació de velocitat i ordre de reacció. Velocitat de reacció i temperatura. Catàlisi.

BLOC III - COMPOSTOS ORGÀNICS I BIOMOLÈCULES

12. Química del carboni

Hydrocarburs alifàtics i aromàtics.- Derivats halogenats.- Alcohols, èters i tiols.- El grup carbonil: aldehids i cetones.- El grup carboxil: àcids i derivats.- El grup amino.- Compostos orgànics, contaminació i toxicitat.

13. Biomolècules

Elements químics presents als éssers vius. Biomolècules. Nivells d'organització estructural de les biomolècules. Proteïnes: seqüència, estructura secundària i tridimensional. Importància de les interaccions febles en medi aquós. Relació estructura-funció-evolució a proteïnes. Nucleòtids i àcids nucleics: estructura del DNA i organització del material genètic. Sucres i lípids com compostos estructurals, de reserva i funcionals.

14. Enzims i catàlisi enzimàtica

Naturalesa i funció dels enzims. Efectes dels catalitzadors en les reaccions químiques. Activitat enzimàtica: concepte de velocitat inicial. Cinètica enzimàtica: model de Michaelis-Menten. Regulació de l'activitat enzimàtica. Aplicacions biomèdiques i biotecnològiques.

15. Caracterització estructural de biomolècules

Introducció a les tècniques de purificació i caracterització de biomolècules. Mètodes espectroscòpics per a l'anàlisi de l'estructura de les biomolècules. Materials i metodologia de clonatge del DNA: enzims de restricció, vectors, hibridació, mètodes de purificació dels productes i aplicacions. Tècniques de la PCR i de seqüenciació del DNA. Algunes aplicacions de l'enginyeria genètica.

Metodologia

Classes magistrals:

El professor imparteix els coneixements bàsics de l'assignatura a les classes magistrals, procurant que quedi clara la seva aplicabilitat a la resolució de problemes relacionats amb el medi ambient. Tot i que aparentment, l'alumne no tingui una participació molt activa en aquest tipus de docència, cal promoure al màxim la seva participació posant qüestions a classe, impulsant que els alumnes expressin els seus dubtes i les seves idees, tant a la mateixa classe, com després de l'estudi personal dels temes impartits.

Classes de problemes:

Són fonamentals per posar en pràctica els coneixements adquirits i saber-los aplicar a la resolució de problemes. Aquí és imprescindible que els estudiants tinguin una participació molt activa, resolent (o, almenys, intentant resoldre) els problemes proposats amb anterioritat a la classe presencial. D'aquesta manera, els alumnes podran interaccionar amb el professor proposant mètodes per resoldre problemes, consultant la

possibilitat de resoldre'ls per mètodes alternatius i adonant-se dels coneixements que no havien adquirit prou correctament. El fet de dividir les classes de problemes en dos subgrups, menys nombrosos que les classes de teoria, afavoreix aquesta interacció.

El professor podrà també requerir l'entrega de problemes resolts pels alumnes per a la seva correcció i avaluació. En algun cas, el professor podrà també requerir que els alumnes facin una exposició oral del problema que han resolt.

Pràctiques de laboratori:

Les pràctiques de laboratori són molt importants des d'un doble vessant- D'una banda permeten que els alumnes vegin l'aplicació dels coneixements adquirits al món real. D'altra banda, els permetran adquirir la metodologia experimental i aprendre tècniques que els seran d'utilitat a la seva futura vida professional.

Activitats formatives

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Tipus: Dirigides			
Classes de Teoria	50	2	2, 7, 8, 9, 10, 12, 15, 16, 20
Pràctiques de Laboratori	15	0,6	1, 3, 4, 5, 17, 18, 19, 20, 21
Tipus: Supervisades			
Resolució de Problemes a l'Aula	10	0,4	1, 3, 17, 20
Tipus: Autònomes			
Estudi Personal i Resolució de Problemes	140	5,6	3, 17, 20

Avaluació

L'avaluació de l'assignatura es durà a terme mitjançant la ponderació següent:

- Proves escrites (70%)
- Lliurament de problemes (15%)
- Pràctiques de laboratori (15%)

Avaluació mitjançant proves escrites:

En les proves escrites s'avaluen els coneixements assolits per l'alumne, així com la seva capacitat d'anàlisi, de síntesi, i de raonament crític.

Proves parcials escrites: Hi haurà dues proves parcials. La matèria avaluada serà la corresponent als temes que s'anunciaran oportunament, amb una antelació suficient. Els alumnes que aprovin amb les proves parcials (mitjana superior a 5 i ambdós parcials amb nota superior a 3), quedaran deslliurats de presentar-se a la prova final. Els alumnes amb nota mitjana superior a 5 però algun dels parcials amb nota inferior a 3 caldrà que es presentin a la prova final, tot i que només a la part corresponent al temari no superat.

Prova final escrita:

Constarà de dues parts, cadascuna d'elles cobrint el temari avaluat a les corresponents proves parcials. Caldrà que s'hi presentin els alumnes que no hagin aprovat per parcials (nota mitjana inferior a 5 o alguna de les dues notes parcials inferior a 3) o que no s'hi hagin presentat. Per tal de superar-la caldrà una nota mitjana

superior a 5 (si l'alumne ha de realitzar ambdues parts) o nota superior a 5 (si l'alumne només s'ha de presentar a una de les parts). També s'hi podran presentar (a la seva totalitat o a una de les parts) els alumnes que desitgin millorar la seva nota. En aquest últim cas la nota que prevaldrà serà la de l'exàmen final (si aquesta és superior) o la mitjana entre la final i la parcial, si aquesta és inferior.

Avaluació a través del lliurament de problemes:

Quan el professor ho consideri oportú, podrà requerir el lliurament de problemes resolts que seran avaluats. Eventualment, es podrà demanar la seva exposició oral a classe, exposició que també serà avaluada.

Avaluació de les pràctiques de laboratori:

Presentació dels resultats obtinguts durant les pràctiques i de les respostes al qüestionari proposat. També es tindrà en compte l'actitud i la manera de treballar al laboratori.

L'assistència a les pràctiques de laboratori és obligatòria. No assistir-hi sense justificació impedirà aprovar l'assignatura. En cas de no assistir justificadament a alguna de les sessions

de pràctiques i de no tenir opció de realitzar-la en un grup diferent a l'assignat, no es considerarà aquesta sessió en el càlcul de la nota de pràctiques.

Els "no presentats"

Un alumne es considerarà No Presentat si la qualificació màxima del número d'activitats d'avaluació realitzades és inferior al 50% del total de les programades per a l'assignatura.

Activitats d'avaluació

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Informes de Laboratori	15%	1	0,04	1, 3, 4, 5, 17, 18, 19, 20, 21
Lliurament de Problemes	15%	1	0,04	1, 3, 4, 5, 19, 20
Prova Final Escrita	70%	4	0,16	2, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16
Proves Parcial Escrites	70%	4	0,16	2, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16

Bibliografia

Bibliografia Bàsica:

R.H. Petrucci, W.S. Harwood, F.G. Herring: Química general. Enlace químico y estructura de la materia, Vol. 1, Ed. Prentice Hall, 2003

R. Chang: Química General, 9ª edición, Ed. McGraw-Hill, 2007

J.Casabò: Estructura atómica y enlace, Ed. Reverté, 1996

P. Atkins, L. Jones: Principios de Química, 3ª edición, Ed. Panamericana, 2006

F. D. Ferguson y T. K. Jones La regla de las fases. Editorial Alhambra, 1968.

D.L.Nelson, M.M. Cox: Lehninger-Principios de Bioquímica, 5ª ed., Ed. Omega, 2009

Stryer, L., Berg, J.M., Timoczko, T.: Bioquímica, 6ª ed., Ed. Reverté, 2007

Llibres de problemes:

J.A. López Cancio. Problemas de Química. Cuestiones y ejercicios. Prentice Hall, 2000

A. Navarrete, A. Garcia. La resolución de los problemas en química. Anaya, 2004

Formulació:

SALES; VILARRASA. Introducció a la nomenclatura química. 5a ed. Reverté SA, 2003