

**Fonaments de Química**

Codi: 102447  
Crèdits: 6

Titulació	Típus	Curs	Semestre
2500897 Enginyeria Química	FB	1	1

**Professor de contacte**

Nom: Xavier Solans Monfort  
Correu electrònic: Xavier.Solans@uab.cat

**Utilització d'idiomes a l'assignatura**

Llengua vehicular majoritària: català (cat)  
Grup íntegre en anglès: No  
Grup íntegre en català: Sí  
Grup íntegre en espanyol: No

**Equip docent**

Danilo González Forero  
Sonia Romero Tellez

**Prerequisits**

Seria convenient que l'alumne tingués coneixements previs de formulació química inorgànica i de qüestions bàsiques sobre reaccions químiques (concepte de mol, càlculs estequiomètrics)

**Objectius**

Adquisició de coneixements bàsics en el marc de la Química. Molts d'aquests conceptes ja poden estar en possessió de l'alumne si ha cursat Química al llarg de la seva formació però en aquesta assignatura es tractarà de consolidar i enfortir aquest coneixement de cara a les necessitats que li sorgiran en altres assignatures que cursarà posteriorment. A un segon nivell l'assignatura pretén aprofundir en el coneixement de la matèria partint del punt de vista atòmic-molecular (visió microscòpica) i arribant a la visió més experimental i macroscòpica que és la que l'alumne coneix de forma intuïtiva. També es preten començar a concienciar l'alumne en que no n'hi ha prou amb la simple assimilació de conceptes i que en algun moment cal fer un anàlisi crític dels coneixements previs per tal de poder avançar en el món de la ciència.

**Competències**

- Aplicar coneixements rellevants de les ciències bàsiques, com són les matemàtiques, la química, la física i la biologia, i també principis d'economia, bioquímica, estadística i ciència de materials, per comprendre, descriure i resoldre problemes típics de l'enginyeria química.
- Aplicar el mètode científic a sistemes en què es produeixin transformacions químiques, físiques o biològiques tant a escala microscòpica com macroscòpica.
- Aplicar els coneixements i les competències adquirides per elaborar un projecte d'enginyeria química.
- Hàbits de pensament

**Resultats d'aprenentatge**

1. Aplicar el mètode científic en l'àmbit dels equilibris en dissolució i la química orgànica.
2. Aplicar les diferents teories d'enllaç a les molècules per deduir-ne l'estructura, la geometria i les propietats fisicoquímiques i comprendre els avantatges i les limitacions que cada una mostra.
3. Aplicar les normes de nomenclatura per anomenar els compostos químics i reconèixer les diferents maneres d'expressar les concentracions en dissolució.
4. Descriure els principis bàsics de la mecànica quàntica, el significat físic dels números quàntics i el seu efecte en la quantificació de l'energia.
5. Desenvolupar la capacitat d'anàlisi, síntesi i prospectiva.
6. Desenvolupar un pensament i un raonament crítics
7. Explicar l'origen de l'ordenació dels elements químics en la taula periòdica i com varien les diferents propietats periòdiques a través de la taula periòdica.
8. Identificar els diferents tipus de reaccions químiques i igualar correctament les equacions corresponents.
9. Interpretar el significat físic de la funció d'ona orbital i aplicar els principis de quantificació de l'energia a la generació de les diferents funcions orbitals dels àtoms hidrogenoides i no hidrogenoides.
10. Interpretar la naturalesa dels diferents tipus d'enllaç en els sòlids metàl·lics i aplicar-ne les conseqüències a la interpretació de la seva estructura i propietats.
11. Resumir el comportament dels gasos i les diferents lleis que els descriuen.
12. Utilitzar els coneixements adquirits en el disseny d'anàlisis i processos.

## Continguts

**Lliçó 1:** Matèria i compostos químics. Composició de la matèria. Nomenclatura i formulació de compostos inorgànics. Mesures de les propietats de la matèria. Mescles: dissolucions i mesures de concentració.

**Lliçó 2:** Introducció a les reaccions químiques: Reaccions químiques i càlculs estequiomètrics. Reaccions químiques en dissolució: precipitació, àcid-base i redox.

**Lliçó 3:** Estructura atòmica: radiació electromagnètica. Dualitat ona-partícula i principi d'incertesa. Funció d'ona i nivells d'energia. Àtom d'hidrogen. Nombres quàntics i orbitals. Àtoms polieletrònics. Configuracions electròniques i taula periòdica. Classificació dels elements. Periodicitat i taula periòdica. Radis atòmics i iònics. Energia d'ionització i afinitat electrònica.

**Lliçó 4:** Enllaç químic: teoria de Lewis. Enllaç covalent. Electronegativitat. Àcids i bases de Lewis. Geometria molecular (VSEPR). Moment dipolar. Distància i energia d'enllaç. Teoria dels orbitals moleculars de molècules diatòmiques.

**Lliçó 5:** L'enllaç en sòlids i líquids. Sòlids i líquids moleculars. Forces intermoleculars en sòlids i líquids: tensió superficial i viscositat, pressió de vapor, diagrames de fases. Tipus de sòlids. L'enllaç en els metalls: teoria de bandes, estructura dels metalls. Enllaç iònic: estructures cristal·lines iòniques, energia reticular. Sòlids covalents.

## Metodologia

Classes magistrals (2 hores a la setmana); classes aplicades de resolució de problemes (1 h a la setmana); seminaris en grups reduïts per presentar aplicacions dels conceptes químics en el món actual (tant en general com en la recerca avançada no exclusivament química)

## Activitats formatives

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
<b>Tipus: Dirigides</b>			
Classes de problemes	15	0,6	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12

classes de teoria	30	1,2	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12
seminaris	20	0,8	1, 5, 6, 12
<b>Tipus: Supervisades</b>			
Realització de problemes	30	1,2	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12
<b>Tipus: Autònomes</b>			
Estudi	45	1,8	2, 3, 4, 7, 8, 9, 10, 11

## Avaluació

**Proves escrites:** N'hi haurà un total de tres, dues al final del curs. Les dues primeres proves seran parcials i tindran lloc una a mig curs (sobre la primera meitat del temari) i l'altre al final sobre la resta del temari. En total aquestes proves tindran un valor del 70% en la qualificació de l'assignatura. Cal obtenir com a mínim un 4,5 sobre 10 a cadascun dels dos parcials per poder aprovar l'assignatura. Així, els alumnes que no obtinguin una nota igual o superior a 4,5 en el primer parcial no es podran presentar al segon parcial. Els alumnes que, després d'aquest procés, suspenguin l'assignatura s'hauran de presentar a l'examen de recuperació. Un aprovat d'aquest examen final implicarà aprovar l'assignatura.

**Problemes - Tests:** Cada setmana es lliurarà als alumnes una llista de problemes que hauran de resoldre (de forma autònoma o demanant ajut). Al llarg del curs es plantejaràn problemes similars o test relacionats que s'hauran d'entregar amb dos o tres dies de marge. En el cas dels tests, aquests seran a través del moodle. El nombre de problemes i tests a avaluar no està predeterminat i els alumnes no sabran amb anticipació quan se'ls hi plantejarà un nou problema. La correcció d'aquests problemes contarà el 15% de la nota final.

**Presentació d'un tema actual relacionat amb l'assignatura:** En grups de 5-6 alumnes es faran presentacions d'uns 20 minuts sobre temes d'interès actual relacionats amb l'assignatura. La valoració d'aquestes presentacions i les respostes a les preguntes que es facin a continuació tindran un pes del 15% en la nota global. Aquesta activitat està especialment dirigida a avaluar les competències trasnversals previstes per l'assignatura.

**Revisió d'examens i reclamacions:** En el plaç màxim d'una setmana després de la publicació de la nota final es programarà un calendari prou ample per tal que l'alumne pugui revisar els examens, comentar la nota amb el professor i repassar l'assignació de les diferents parts que configuren la nota final de l'assignatura. En aquest context es podran fer reclamacions sobre la nota final que seran avaluades pel professor responsable en el període màxim d'una setmana des que hagin estat formulades.

**Matrícules d'Honor:** En el cas d'obtenir una nota final ponderada de 9 o superior l'alumne optarà a obtenir matrícula d'Honor. Donat que existeix la limitació del nombre de matrícules al 5% o fracció dels alumnes matriculats, en el cas de que el nombre d'alumnes amb nota superior a 9 sigui superior al màxim de matrícules que es poden atorgar l'assignació es farà seguint estrictament l'ordre decreixent de la nota final. En cas contrari tots els alumnes amb nota superior a 9 obtindran la qualificació de Matrícula d'Honor.

**Segones (i posteriors) matrícules:** Els alumnes que no es matriculin per primera vegada de l'assignatura i que ja s'hagin presentat sense haver superat l'assignatura tenen l'opció de presentar-se només a l'examen final i, si ho volen, a l'examen parcial pre-programat. En aquest cas la nota final serà en un 100% basada en aquest (o aquests) examens sense cap percentatge de la resta d'evidències. Les notes d'aquestes altres evidències (problemes entregats, presentació oral) que s'hagin obtingut en convocatòries prèvies no s'usaran per obtenir la nota final d'una convocatòria posterior.

**Nota:** Aquesta normativa no s'aplica als alumnes que assisteixen d'oients l'avaluació dels quals seguirà el que diguila guia docent de l'assignatura a la que realment estan matriculats.

## Activitats d'avaluació

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Presentació oral	15%	1	0,04	1, 5, 6, 12
Problemes - Tests	15%	3	0,12	1, 2, 3, 4, 7, 8, 9, 10, 11, 12
proves escrites	70%	6	0,24	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12

## Bibliografia

### BIBLIOGRAFIA BàSICA:

R. Chang, Química. Ed. McGraw-Hill, 10<sup>a</sup> edició (2010). ISBN: 978-607-15-0307-7

R. H. Petrucci, W. S. Harwood, F. G. Herring, Química General, Ed. Pearson, 10<sup>a</sup> edició (2011). ISBN: 978-84-8322-680-3 (disponible en versió electrònica a la xarxa de la UAB)

P. Atkins, Principios de Química, Ed. Panamericana, 5<sup>a</sup> edició (2010). ISBN: 9789500602822

R. Chang, Fundamentos de Química, Ed. McGraw-Hill (2011). ISBN: 978-607-15-0541-5

J. Rosenberg, L. Epstein, P. Krieger, Química, Ed. McGraw-Hill, 10<sup>a</sup> edició (2014). ISBN:978-607-15-1147-8

### BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTÀRIA:

J. CASABÓ, Estructura atòmica y enlace químico, Ed. Reverté.

F. CENTELLES, E. BRILLAS, X. DOMÈNECH, R. M. BASTIDA, Fonaments d'estructura atòmica i de l'enllaç químic. Publicacions de la Universitat de Barcelona-Barcanova.

J. M. COSTA, J. M. LLUCH, J. J. PÉREZ, Química. Estructura de la matèria. Enciclopèdia Catalana. Biblioteca Universitària.

P. A. COX, Introduction to quantum theory and atomic structure, Oxford chemistry primers.

H. B. GRAY, Chemical bonds: an introduction to atomic and molecular structure, University Science Books

Y. JEAN, F. VOLATRON, Atomistique et liaison chimique, Ed. Science International.

B. MAHAN Química. Curso universitario. Ed. Addison Wesley.

M. PARAIRA, J. J. PÉREZ GONZÁLEZ, Cálculos básicos en estructura atòmica y molecular. Ed. Vicens -Vives

M. J. WINTER, Chemical Bonding, Oxford chemistry primers.