

Fonaments de Química

Codi: 102447
Crèdits: 6

Titulació	Típus	Curs	Semestre
2500897 Enginyeria Química	FB	1	1

Professor/a 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

L'assignatura està dividida en quatre parts ben diferenciades. En la primera part es repassen conceptes que l'alumne hauria d'haver adquirit a batxillerat tals com formulació, igualació de reaccions químiques i càlculs estequiomètrics. En una segona part, s'estudia l'estructura atòmica que permetrà establir les bases per afrontar l'enllaç químic en molècules (3a part), així com l'enllaç en sòlids (4a part).

En aquest sentit, l'assignatura té quatre objectius bàsics.

- Realitzar càlculs estequiomètrics associats a reaccions i processos relativament complexos.
- Discutir les diferents propietats periòdiques dels elements i relacionar-les amb la seva estructura electrònica.
- Discernir entre els diferents tipus d'enllaç i ser capaç de descriure'l mitjançant les diferents teories per descriure l'enllaç
- Conèixer les estructures cristal·lines més habituals i analitzar-ne algunes propietats com el nombre de coordinació dels constituents, la densitat del material o l'energia reticular.

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

La assignatura es divideix en quatre parts ben diferenciades i 4 lliçons.

1a part: Nomenclatura i càlculs estequiomètrics

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.

2a part: Estructura atòmica

Lliçó 3: Àtoms hidrogenoïdes: radiació electromagnètica. Dualitat ona-partícula i principi d'incertesa. Funció d'ona i nivells d'energia. Àtom d'hidrogen. Nombres quàntics i orbitals.

Lliçó 4: Àtoms polieletrònics: Configuracions electròniques i taula periòdica. Classificació dels elements. Periodicitat i taula periòdica. Radis atòmics i iònics. Energia d'ionització i afinitat electrònica. Electronegativitat.

3a part: Enllaç químic en sistemes moleculars

Lliçó 4: Teoria de Lewis de l'enllaç: Enllaç covalent, iònic i metàl·lic. Estructures de Lewis. Geometria molecular (VSEPR). Moment dipolar. Distància i energia d'enllaç.

Lliçó 5: Teoria de l'enllaç de valència: Enllaç sigma, pi i delta. Recobriment d'orbitals. Orbitals híbrids. Hibridacions més comunes.

Lliçó 6: Teoria dels orbitals moleculars: Orbital molecular. Aproximació de la combinació lineal d'orbitals atòmics. Molècules diatòmiques. Molècules H₂A.

4a part: Estructura electrònica dels sòlids cristal·lins

Lliçó 7: Introducció a la descripció dels sòlids i sòlids moleculars: Tipus de sòlids: Moleculars, covalents, iònics i metàl·lics. Forces intermoleculars en sòlids i líquids:

Lliçó 9: L'enllaç en els metalls: Estructura dels sòlids metàl·lics. Empaquetament cúbic simple, cúbic centrat al cos i empaquetaments compactes. Teoria de bandes: metalls, semiconductors i aïllants

Lliçó 10: L'enllaç en els sòlids iònics: estructures cristal·lines iòniques. Nombre de coordinació. Regla dels radis. Energia reticular.

Metodologia

Classes magistrals (2 hores a la setmana); classes aplicades de resolució de problemes (1 h a la setmana); seminaris per repassar i contextualitzar els continguts impartits fins aquell moment.

Activitats formatives

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Tipus: Dirigides			
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	6	0,24	1, 5, 6, 12
Tipus: Supervisades			
Realització de problemes	23	0,92	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12
Tipus: Autònomes			
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 60% 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. Els alumnes que obtinguin menys d'un 4.5 d'un dels dos parcials s'hauran de presentar a l'examen de recuperació. Aquest examen constarà de dues parts: una associada als continguts de la primera part del temari i l'altra als continguts de la segona part. L'estudiant només haurà d'examinar-se d'aquella part que no hagi assolit el 4,5.

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.

Realització d'un video en grup: En grups de 5-6 alumnes es realitzarà un video curt presentant conceptes relacionats amb el temari de l'assignatura. Aquests videos seran compartits amb tota la classe i uns dies més tard es realitzarà un petit test individual sobre el contingut dels videos. Aquesta activitat contribueix amb un 15% a la nota final de l'assignatura que serà el resultat de l'avaluació del video presentat (67%) i de la nota del test (33%). Aquesta activitat està especialment dirigida a avaluar les competències transversals previstes per l'assignatura.

Realització de les activitats proposades al llarg del curs: Al llarg del curs es proposaran diverses activitats relacionades amb l'assignatura (mínim 3 o 4 al mes) que l'alumne haurà de resoldre i informar del resultat obtingut mitjançant un procés d'autoavaluació (o avaluació a través del moodle) al professor. La realització del 80% d'aquestes activitats (indiferentment de si han estat realitzades correctament) equivaldrà a un 10% de la nota final.

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'activitats. Les notes d'aquestes altres activitats 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 assisteixin d'oients l'avaluació dels quals seguirà el que digui la guia docent de l'assignatura a la que realment estan matriculats.

Activitats d'avaluació

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Creació d'un video en grup	15%	5	0,2	1, 2, 3, 5, 6, 8, 10, 12
Problemes - Tests	15%	5	0,2	1, 2, 3, 4, 7, 8, 9, 10, 11, 12
Realitzar les activitats proposades relacionades amb l'assignatura	10%	15	0,6	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12
proves escrites	60%	6	0,24	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12

Bibliografia

BIBLIOGRAFIA Bàsica:

R. H. Petrucci, W. S. Harwood, F. G. Herring, *Química General*, Ed. Pearson, 10^a 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, 5ª edición (2010). ISBN: 9789500602822

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