

Fonaments de Química

Codi: 102447
Crèdits: 6

Titulació	Tipus	Curs	Semestre
2500897 Enginyeria Química	FB	1	1

Professor/a de contacte

Nom: Ricard Gelabert Peiri
Correu electrònic: Ricard.Gelabert@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

Ricard Gelabert Peiri

Prerequisits

És convenient que l'alumne tingui coneixements previs de formulació química inorgànica així com de qüestions bàsiques sobre reaccions químiques (concepte de mol, igualació de reaccions, càlculs estequiomètrics...).

Objectius

L'assignatura està dividida en quatre parts diferenciades. En la primera es *repassen* conceptes que haurien d'haver-se adquirit a batxillerat, tals com formulació i nomenclatura química, igualació de reaccions químiques i realització de càlculs estequiomètrics. La segona part estudia l'estructura electrònica i permet sentar les bases per estudiar l'enllaç químic en molècules (tercera part) i en sòlids (quarta part).

Així doncs, l'assignatura té quatre objectius bàsics:

1. Realitzar càlculs estequiomètrics associats a reaccions i processos relativament complexos.
2. Discutir les propietats periòdiques dels elements químics, i relacionar-les amb la seva estructura electrònica.
3. Distingir els diferents tipus d'enllaç i ser capaços de descriure'ls mitjançant les diferents teories disponibles.
4. Conèixer les estructures cristal·lines més usuals i analitzar-ne diferents propietats, com ara el nombre de coordinació dels diferents àtoms constituents, la seva densitat 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

Part I: Nomenclatura Inorgànica. Estequiometria.

Lliçó 1: Matèria i Compostos químics. Composició de la matèria. Nomenclatura i formulació de compostos inorgànics. Mesura 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.

Part II: estructura Atòmica.

Lliçó 3: Àtoms Hidrogenoïdes. Radiació electromagnètica. Dualitat ona-corpúscle. Principi d'incertesa. Funció d'ona i nivells d'energia. Àtoms hidrogenoides. Nombres quàntics i orbitals.

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

Part III: Enllaç Químic en Sistemes Moleculars.

Lliçó 5: Teoria de Lewis. Enllaç covalent, iònic i metàl·lic. Estructures de Lewis. Geometria molecular. Teoria de repulsió de parells electrònics a la capa de valència (VSEPR). Moment dipolar. Distància d'enllaç. Energia d'enllaç.

Lliçó 6: Teoria de l'enllaç de valència. Enllaços sigma, pi i delta. Recobriment d'orbitals. Orbitals híbrids. Hibridacions més comunes.

Lliçó 7: Teoria d'Orbitals Moleculars. Orbital molecular. Aproximació de la combinació lineal d'orbitals atòmics. Molècules diatòmiques. Molècules H₂A.

Part IV: Estructura dels Sòlids Cristal·lins.

Lliçó 8: 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

Tenen un 60% de pes en la nota final de l'assignatura. Es programaran tres exàmens al llarg del curs, dos d'ells exàmens parcials (una aproximadament a mig curs, l'altre al final, ambdues amb el mateix pes) i un de repesca. Les dues proves parcials cobriran aproximadament la meitat del temari cadascuna. Per poder fer promig amb les notes de la resta d'ítems descrits a aquesta guia docent cal que l'alumne obtingui una nota mínima de 4.5 sobre 10 en ambdues proves parcials. Cas de no assolir aquesta qualificació mínima en qualsevol dels exàmens parcials, l'alumne haurà forçosament de presentar-se a l'examen de repesca, on també cal obtenir una nota mínima de 4.5 sobre 10 per poder fer promig.

Evidències:

Tenen un 20% de pes en la nota final de l'assignatura. Al llarg del curs es proposaran alguns exercicis (el número dels quals no està prefixat) per realitzar fora de l'aula i ser lliurats a títol individual per escrit al cap d'uns dies, per ser corregits. El pes de cadascun d'aquests exercicis en aquest apartat no serà necessàriament el mateix i pot variar en funció de la dificultat dels exercicis proposats.

Activitats d'Autoavaluació:

Tenen un pes del 10% en la nota final de l'assignatura. En moments adients en referència al temari cobert es proposaran activitats d'autoavaluació normalment via Aula Moodle, on estaran accessibles durant un temps publicitat d'avantmà.

Activitat en Grup:

Té un pes del 10% en la nota final de l'assignatura. Els alumnes s'agruparan en grups la mida dels quals dependrà del nombre total d'alumnes matriculats (4 a 6) i se'ls assignarà un tema concret tractat al temari perquè facin una activitat en un format per determinar (treball escrit, presentació oral, vídeo per visionar *off-line*, etc.) Aquesta activitat es proposarà en dates properes al final de curs per tal de garantir que la major part del temari s'hagi cobert. La qualificació reflectirà no només la correcció acadèmica dels continguts i formal de la presentació, sinó també la contribució de tots els membres del grup de forma equitativa.

Nota: Alumnes en segona matrícula i posteriors:

Els alumnes que matriculats per segona o posterior vegada de l'assignatura i que no l'hagin superat tot i haver-se presentat (és a dir, tot i tenir una qualificació numèrica d'anteriors convocatòries) tenen l'opció de presentar-se únicament a les proves escrites (parcials, i si cal, repesca). En aquest cas, la nota final dels alumnes que optin per aquesta via estarà formada al 100% per la nota obtinguda en els parcials (o l'examen de repesca) calculada d'acord amb el què s'exposa a l'apartat «Proves Escrites», sense contribució de cap altra activitat que puguin haver realitzat, bé en el curs actual, bé en qualsevol convocatòria anterior. Es fa notar que en aquest cas per aprovar l'assignatura cal obtenir una nota de l'apartat de Proves Escrites de 5.0 sobre 10.0, atès que no hi ha altres ítems en la nota. Els alumnes que optin per aquesta via d'avaluació ho han de manifestar expressament per escrit (E-Mail) al professor titular de l'assignatura abans de la realització del primer examen parcial.

Tenen un 60% de pes en la nota final de l'assignatura. Es programaran tres exàmens al llarg del curs, dos d'ells exàmens parcials (una aproximadament a mig curs, l'altra al final, ambdues amb el mateix pes) i un de repesca. Les dues proves parcials cobriran aproximadament la meitat del temari cadascuna. Per poder fer promig amb les notes de la resta d'ítems descrits a aquesta guia docent cal que l'alumne obtingui una nota mínima de 4.5 sobre 10 en ambdues proves parcials. Cas de no assolir aquesta qualificació mínima en qualsevol dels exàmens parcials, l'alumne haurà forçosament de presentar-se a l'examen de repesca, on també cal obtenir una nota mínima de 4.5 sobre 10 per poder fer promig.

Evidències:

Tenen un 20% de pes en la nota final de l'assignatura. Al llarg del curs es proposaran alguns exercicis (el número dels quals no està prefixat) per realitzar fora de l'aula i ser lliurats a títol individual per escrit al cap d'uns dies, per ser corregits. El pes de cadascun d'aquests exercicis en aquest apartat no serà necessàriament el mateix i pot variar en funció de la dificultat dels exercicis proposats.

Activitats d'Autoavaluació:

Tenen un pes del 10% en la nota final de l'assignatura. En moments adients en referència al temari cobert es proposaran activitats d'autoavaluació normalment via Aula Moodle, on estaran accessibles durant un temps publicitat d'avantmà.

Activitat en Grup:

Té un pes del 10% en la nota final de l'assignatura. Els alumnes s'agruparan en grups la mida dels quals dependrà del nombre total d'alumnes matriculats (4 a 6) i se'ls assignarà un tema concret tractat al temari perquè facin una activitat en un format per determinar (treball escrit, presentació oral, vídeo per visionar *off-line*, etc.) Aquesta activitat es proposarà en dates properes al final de curs per tal de garantir que la major part del temari s'hagi cobert. La qualificació reflectirà no només la correcció acadèmica dels continguts i formal de la presentació, sinó també la contribució de tots els membres del grup de forma equitativa.

Nota: Alumnes en segona matrícula i posteriors:

Els alumnes que matriculats per segona o posterior vegada de l'assignatura i que no l'hagin superat tot i haver-se presentat (és a dir, tot i tenir una qualificació numèrica d'anteriors convocatòries) tenen l'opció de presentar-se únicament a les proves escrites (parcials, i si cal, repesca). En aquest cas, la nota final dels alumnes que optin per aquesta via estarà formada al 100% per la nota obtinguda en els parcials (o l'examen de repesca) calculada d'acord amb el què s'exposa a l'apartat «Proves Escrites», sense contribució de cap altra activitat que puguin haver realitzat, bé en el curs actual, bé en qualsevol convocatòria anterior. Es fa notar que en aquest cas per aprovar l'assignatura cal obtenir una nota de l'apartat de Proves Escrites de 5.0 sobre 10.0, atès que no hi ha altres ítems en la nota. Els alumnes que optin per aquesta via d'avaluació ho han de manifestar expressament per escrit (E-Mail) al professor titular de l'assignatura abans de la realització del primer examen parcial.

Activitats d'avaluació

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Activitat en Grup	10%	5	0,2	1, 2, 3, 5, 6, 8, 10, 12
Activitats d'Autoavaluació	10%	5	0,2	1, 2, 3, 4, 7, 8, 9, 10, 11, 12
Evidències	20%	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 Ed. (2011). ISBN: 978-8483226803 (disponible en versió electrònica a la xarxa de la UAB). Hi ha una edició més recent (11^a Ed., 2017), ISBN: 978-8490355336.
- R. Chang, *Fundamentos de Química*, Ed. McGraw-Hill (2011). ISBN: 978-6071505415.
- P. Atkins, *Principios de Química*, Ed. Panamericana, 5^a Ed. (2010). ISBN: 978-9500602822.