

Fonaments de Química

Codi: 102447
Crèdits: 6

Titulació	Tipus	Curs	Semestre
2500897 Enginyeria Química	FB	1	1

La metodologia docent i l'avaluació proposades a la guia poden experimentar alguna modificació en funció de les restriccions a la presencialitat que imposin les autoritats sanitàries.

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 molt recomanable que l'alumne hagi adquirit, prèviament a cursar aquesta assignatura, coneixements de formulació i nomenclatura química inorgànica, i estigui familiaritzat amb conceptes bàsics de química, com per exemple: mol, valència, estat d'oxidació, i igualació de reaccions químiques, i que sigui capaç de fer càlculs estequiomètrics.

Objectius

L'assignatura té per objectiu bàsic proporcionar a l'alumne una base conceptual dels fonaments de la química. L'assignatura està dividida en quatre parts diferenciades. En la primera part es repassen conceptes que haurien d'haver-se adquirit a batxillerat, tals com formulació i nomenclatura química, tipus de reaccions químiques més comunes, igualació de reaccions químiques i la realització de càlculs estequiomètrics. La segona part canvia la perspectiva, pren un enfocament més atomístic i estudia la descripció mecanoquàntica de l'àtom d'hidrogen i explica a partir d'ella l'estructura electrònica dels àtoms de molts electrons i finalment, la taula periòdica. La tercera part tracta les característiques diferencials dels diferents tipus d'enllaç químic, aborda l'estructura molecular i com es pot justificar l'existència de les interaccions intermoleculars i els efectes macroscòpics que aquestes tenen. Finalment, la quarta part aborda l'estat sòlid, explica l'estructura dels sòlids cristal·lins, amb un especial èmfasi en els sòlids iònics (però no només aquests).

Es poden enumerar els següents objectius generals per l'assignatura. Un cop superada l'assignatura, l'alumne hauria de ser capaç de:

- realitzar càlculs estequiomètrics associats a reaccions i processos relativament complexos, així com anomenar i formular compostos inorgànics senzills.
- interpretar correctament el concepte d'orbital atòmic hidrogenoide, poder-los representar i reconèixer-los per la seva forma, i realitzar càlculs quantitativs senzills amb ells, determinant direccions i distàncies de màxima probabilitat.

- predir la configuració electrònica d'àtoms i ions, i discutir les propietats periòdiques dels elements químics a partir de la primera.
- distingir els diferents tipus d'enllaç i descriure'ls mitjançant les diferents teories disponibles.
- predir la geometria de molècules covalents així com establir l'existència i intensitat de possibles polaritats.
- predir el tipus i intensitat de les forces intermoleculars entre molècules discretes, i les conseqüències d'aquestes en propietats macroscòpiques de les substàncies.
- reconèixer les estructures cristal·lines més usals i calcular-ne diferents propietats, com ara el nombre de coordinació dels diferents àtoms constituents, la seva densitat o en el cas dels cristalls iònics, 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.
- Hàbits de pensament
- Hàbits de treball personal
- Que els estudiants hagin demostrat que comprenen i tenen coneixements en una àrea d'estudi que parteix de la base de l'educació secundària general, i se sol trobar a un nivell que, si bé es basa en llibres de text avançats, inclou també alguns aspectes que impliquen coneixements procedents de l'avantguarda d'aquell camp d'estudi.
- Que els estudiants sàpiguen aplicar els coneixements propis a la seva feina o vocació d'una manera professional i tinguin les competències que se solen demostrar per mitjà de l'elaboració i la defensa d'arguments i la resolució de problemes dins de la seva àrea d'estudi.

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. Que els estudiants hagin demostrat que comprenen i tenen coneixements en una àrea d'estudi que parteix de la base de l'educació secundària general, i se sol trobar a un nivell que, si bé es basa en llibres de text avançats, inclou també alguns aspectes que impliquen coneixements procedents de l'avantguarda d'aquell camp d'estudi.
12. Resumir el comportament dels gasos i les diferents lleis que els descriuen.
13. Treballar de manera autònoma.

Continguts

Part I: Conceptes Bàsics

- Lliçó 1: Matèria i Compostos Químics. Matèria i substància. Propietats de la matèria. Mesura de propietats. Lleis bàsiques de la química. Mol. Isòtops. Massa molecular. Composició. Fórmula empírica i molecular. Dissolucions. Estats d'oxidació. Nomenclatura i formulació química inorgànica.
- Lliçó 2: Introducció a les Reaccions Químiques. Reaccions químiques. Igualació de reaccions. Càlculs estequiomètrics. Reactiu limitant. Electròlits. Reaccions de precipitació i àcid-base. Àcids i bases forts i febles. Àcids i bases conjugats. Reaccions redox. Igualació de reaccions redox en medi àcid i en medi bàsic.

Part II: Estructura Atòmica

- Lliçó 3: L'Àtom d'Hidrogen. Conceptes de mecànica clàssica. Ones i partícules. Radiació electromagnètica. Antecedents històrics de la mecànica quàntica. Hipòtesis de Planck, Einstein i de Broglie. Dualitat ona-corpúscle. Espectres atòmics. Models de l'àtom. Descripció mecanoquàntica de l'àtom d'hidrogen. Orbitals hidrogenoides. Nombres quàntics. Quantització de l'energia. Degeneració energètica. Representacions dels orbitals hidrogenoides. Funció de distribució radial. Spin electrònic.
- Lliçó 4: Àtoms Polieletrònics. El problema de molts electrons. Aproximació orbital. Principi d'exclusió de Pauli. Apantallament electrònic i càrrega nuclear efectiva. Penetració dels orbitals. Configuració electrònica: principi d'Aufbau. Regla de Hund. Variació periòdica de propietats dels elements: radis atòmics i iònics, energia d'ionització, afinitat electrònica. Electronegativitat. Propietats magnètiques.

Part III: Estructura Molecular

- Lliçó 5: L'Enllaç Químic. Enllaços covalent, iònic i metàl·lic. Tractament aproximat de l'enllaç covalent: Teoria de Lewis. Estructures de Lewis, ressonància. Geometria molecular: Teoria de repulsió de parells electrònics a la capa de valència (VSEPR). Moment dipolar. Distància d'enllaç. Energia d'enllaç. Tractament mecanoquàntic de l'enllaç químic: Teoria d'Orbitals Moleculars. Aproximació de la combinació lineal d'orbitals atòmics (OM-CLOA). Molècules diatòmiques. Enllaç iònic. Enllaç metàl·lic. Annex: Alguns conceptes de la teoria d'enllaç de valència.
- Lliçó 6: Forces Intermoleculars. Forces intra- i intermoleculars. Origen de les forces intermoleculars. Forces ió-íó, ió-dipol permanent, dipol permanent-dipol permanent, dipol permanent-dipol induït. Forces de dispersió. Enllaços d'hidrogen. Manifestació de les forces intermoleculars: temperatures de canvi de fase, solubilitat.

Part IV: Estat Sòlid

- Lliçó 7: Estat Sòlid. Sòlids amorfs i sòlids cristal·lins. Sistemes cristal·lins. Cel·la elemental. Paràmetres de cel·la. Sòlids metàl·lics. Tipus d'empaquetaments: Empaquetaments compactes i no compactes. Sòlids iònics. Estructures cristal·lines iòniques. Regla de la relació de radis. Energia reticular. Sòlids covalents. Sòlids moleculars.

Metodologia

L'assignatura fa servir tres tipus d'activitats formatives: classes de teoria, classes de problemes, i seminaris.

Les classes de teoria (2 h per setmana) s'utilitzaran per desenvolupar els continguts teòrics de l'assignatura usant materials de suport allà on sigui necessari. Aquest material, cas que es faci servir, estarà a disposició dels alumnes per avançar mitjançant la plataforma Campus Virtual. Addicionalment, es disposa de material audiovisual per visionar de forma asíncrona, que es podrà usar segons el professor consideri adient de forma complementària o substitutiva a les classes presencials, sobretot en els temes de repàs.

Les classes de problemes (1 h per setmana) es fan en grup reduït. A l'inici del curs es distribuirà a la plataforma Campus Virtual una col·lecció de problemes per tot el curs, juntament amb un solucionari. Conforme les classes de teoria es vagin desenvolupant es procedirà a resoldre alguns d'aquests problemes de forma detallada i extensa a classe.

Es programaran seminaris al llarg del curs, normalment prop dels exàmens parcials. En aquests seminaris es poden dur a terme diferents activitats: sessions de resolució de dubtes, discussió de problemes o debat de textos seleccionats amb rellevància sobre el temari, a criteri del professor i els interessos mostrats pels alumnes.

Nota: es reservaran 15 minuts d'una classe, dins del calendari establert pel centre/titulació, per a la complementació per part de l'alumnat de les enquestes d'avaluació de l'actuació del professorat i d'avaluació de l'assignatura/mòdul.

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, 12
Classes de Teoria	30	1,2	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 12
Seminaris	6	0,24	1, 5, 6
Tipus: Supervisades			
Realització de Problemes	24	0,96	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 12
Tipus: Autònomes			
Estudi Personal	45	1,8	2, 3, 4, 7, 8, 9, 10, 12

Avaluació

La nota final de l'assignatura prové de quatre ítems d'avaluació: proves escrites, evidències, qüestionaris i un assaig. Això és d'aplicació a tots els alumnes, inclosos els que cursin l'assignatura de nou.

Proves Escrites: Tenen en conjunt un 60% de pes en la nota final de l'assignatura. Es programaran tres exàmens al llarg del curs, dos d'ells exàmens parcials (un aproximadament a mig curs, l'altre al final, ambdós amb el mateix pes) i un de repesca. Els dos exàmens parcials cobriran aproximadament la meitat del temari cadascun mentre que el de repesca cobreix tot el temari. Per poder fer promig amb les notes de la resta d'ítems descrits en aquesta guia docent cal que l'alumne obtingui una nota mínima de 4,0 sobre 10,0 en cadascun dels exàmens 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 per optar a aprovar l'assignatura, on també cal obtenir una nota mínima de 4,0 sobre 10,0 per poder fer promig.

Evidències: Tenen en total un 20% de pes en la nota final de l'assignatura. Al llarg del curs es proposaran alguns exercicis més extensos que poden ser resolts amb el temari explicat fins el moment. Aquests exercicis són individuals i per realitzar normalment fora de l'aula, i en aquest cas per ser lliurats dins d'un termini fixat. El pes de cadascun dels exercicis en aquest apartat no serà necessàriament el mateix i pot variar en funció de la dificultat dels exercicis proposats.

Qüestionaris: Tenen un pes del 10% en la nota final de l'assignatura. En moments adients en referència al temari cobert es proposaran qüestionaris a la plataforma Campus Virtual, on estaran accessibles durant un temps publicitat d'avantmà.

Assaig: Té un pes del 10% a la nota final de l'assignatura. A cada alumne se li assignarà un tema concret de l'àmbit de la química, a poder ser connectat amb el temari o relacionat amb el camp de l'enginyeria química. Els alumnes hauran de fer la cerca d'informació de diverses fonts i hauran de confeccionar una memòria formalment correcta que reculli les seves troballes. A criteri del professor, i en funció de les circumstàncies i del tema triat es podrà autoritzar algun treball en grups reduïts. Aquesta activitat es proposarà en dates

properes al final de curs per tal de garantir que la major part del temari s'hagi cobert. A discrecció del professor es podrà convocar a alguns alumnes presentar públicament els seus resultats i discutir el seu treball.

Activitats d'avaluació

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Assaig	10%	15	0,6	2, 3, 5, 6, 7, 8, 10, 11, 13
Evidències	20%	8	0,32	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 12, 13
Proves Escrites	60%	5	0,2	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 12
Qüestionaris	10%	2	0,08	1, 2, 3, 4, 7, 8, 9, 10, 12

Bibliografia

Qualsevol d'aquests dos llibres:

- R. H. Petrucci, W. S. Harwood, F. G. Herring, *Química General*, 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*, McGraw-Hill, 2011. ISBN: 978-6071505415.

Programari

No es preveu l'ús de programari especialitzat de forma regular durant el curs. Tanmateix, per visualitzar estructures moleculars o cel·les elementals de sòlids si no és possible o convenient usar models a classe, o per alumnes amb dificultats de concepció espacial, alguns programes de visualització d'estructures moleculars podrien fer-se servir (per exemple, Jmol). En casos com aquests o qualsevol altre que sorgeixi es distribuirà a la plataforma Campus Virtual la informació per descarregar, instal·lar i usar aquest programa o programes, que seran de lliure distribució (*shareware* o *freeware*).