

**Fundamentos de Química**

Código: 102447  
Créditos ECTS: 6

Titulación	Tipo	Curso	Semestre
2500897 Ingeniería Química	FB	1	1

## Contacto

Nombre: Ricard Gelabert Peiri

Correo electrónico: ricard.gelabert@uab.cat

## Uso de idiomas

Lengua vehicular mayoritaria: catalán (cat)

Algún grupo íntegramente en inglés: No

Algún grupo íntegramente en catalán: Sí

Algún grupo íntegramente en español: No

## Equipo docente

Ricard Gelabert Peiri

## Prerequisitos

Es muy recomendable que antes de cursar esta asignatura el alumno haya adquirido conocimientos de formulación y nomenclatura química inorgánica, y que esté familiarizado con conceptos básicos de química como: mol, valencia, estado de oxidación, e igualación de reacciones químicas, y que sea capaz de efectuar cálculos estequiométricos.

## Objetivos y contextualización

La asignatura tiene por objetivo básico proporcionar al alumno una base conceptual de los fundamentos de la química. La asignatura está dividida en cuatro partes diferenciadas. En la primera parte se *repasan* conceptos que deberían haberse adquirido en bachillerato, tales como la formulación y nomenclatura química, tipos de reacciones químicas más comunes, igualación de reacciones químicas y la realización de cálculos estequiométricos. La segunda parte cambia la perspectiva, toma un enfoque más atomístico y estudia la descripción mecanocuántica del átomo de hidrógeno, y explica a partir de ella la estructura electrónica de átomos de varios electrones y, finalmente, la tabla periódica. La tercera parte trata las características diferenciales de los diferentes tipos de enlace químico, aborda la estructura molecular y cómo se puede justificar la existencia de interacciones intermoleculares y los efectos macroscópicos que estas tienen. Finalmente la cuarta parte aborda el estado sólido, explica la estructura de los sólidos cristalinos, con un énfasis especial en los sólidos iónicos (pero no sólo éstos).

Se pueden enumerar los siguientes objetivos generales de la asignatura. Una vez superada ésta, el alumno debería ser capaz de:

- realizar cálculos estequiométricos asociados a reacciones y procesos relativamente complejos, así como nombrar y formular compuestos inorgánicos sencillos.
- interpretar correctamente el concepto de orbital atómico hidrogenoide, representarlos y reconocerlos por su forma, y realizar cálculos cuantitativos sencillos con ellos, determinando direcciones y distancias de máxima probabilidad.

- predecir las configuraciones electrónicas de átomos e iones, y discutir las propiedades periódicas de los elementos químicos a partir de la primera.
- distinguir los diferentes tipos de enlace y describirlos mediante las diferentes teorías disponibles.
- predecir la geometría de moléculas covalentes así como establecer la existencia e intensidad de posibles polaridades.
- predecir el tipo e intensidad de las fuerzas intermoleculares entre moléculas discretas, y las consecuencias de éstas en propiedades macroscópicas de las sustancias.
- reconocer las estructuras cristalinas más comunes y calcular para ellas diferentes propiedades, como por ejemplo los números de coordinación de los diferentes átomos constituyentes, su densidad o en el caso de cristales iónicos, su energía reticular.

## Competencias

- Aplicar conocimientos relevantes de las ciencias básicas: Matemáticas, Química, Física y Biología, así como principios de Economía, Bioquímica, Estadística y Ciencia de Materiales que permitan la comprensión, descripción y solución de problemas típicos de la Ingeniería Química.
- Aplicar el método científico a sistemas donde se produzcan transformaciones químicas, físicas o biológicas tanto a nivel microscópico como macroscópico.
- Hábitos de pensamiento
- Que los estudiantes hayan demostrado poseer y comprender conocimientos en un área de estudio que parte de la base de la educación secundaria general, y se suele encontrar a un nivel que, si bien se apoya en libros de texto avanzados, incluye también algunos aspectos que implican conocimientos procedentes de la vanguardia de su campo de estudio.

## Resultados de aprendizaje

1. Aplicar el método científico al ámbito de los equilibrios en disolución y la química orgánica.
2. Aplicar las diferentes teorías de enlace en las moléculas para deducir su estructura, geometría y propiedades fisico-químicas y comprender las ventajas y limitaciones que muestran cada una de ellas.
3. Aplicar las normas de nomenclatura para nombrar los compuestos químicos y reconocer las diferentes formas de expresar las concentraciones en disolución.
4. Desarrollar la capacidad de análisis, síntesis y prospectiva.
5. Desarrollar un pensamiento y un razonamiento crítico.
6. Describir los principios básicos de la mecánica cuántica, el significado físico de los números cuánticos y su efecto en la cuantización de la energía.
7. Explicar el origen de la ordenación de los elementos químicos en la Tabla Periódica y como varían las diferentes propiedades periódicas a través de la Tabla Periódica.
8. Identificar los diferentes tipos de reacciones químicas e igualar correctamente las correspondientes ecuaciones.
9. Interpretar la naturaleza de los diferentes tipos de enlace en los sólidos metálicos y aplicar sus consecuencias a la interpretación de su estructura y propiedades.
10. Que los estudiantes hayan demostrado poseer y comprender conocimientos en un área de estudio que parte de la base de la educación secundaria general, y se suele encontrar a un nivel que, si bien se apoya en libros de texto avanzados, incluye también algunos aspectos que implican conocimientos procedentes de la vanguardia de su campo de estudio.
11. Resumir el comportamiento de los gases y las diferentes leyes que los describen.

## Contenido

Parte I: Conceptos Básicos.

- Lección 1: Materia y Compuestos Químicos. Materia y sustancia. Propiedades de la materia. Medida de propiedades. Leyes básicas de la química. Mol. Isótopos. Masa molecular. Composición. Fórmula

empírica y molecular. Disoluciones. Estados de oxidación. Nomenclatura y formulación química inorgánica.

- Lección 2: Introducción a las Reacciones Químicas. Reacciones químicas. Igualación de reacciones. Cálculos estequiométricos. Reactivo limitante. Electrolitos. Reacciones de precipitación y ácido-base. Ácidos y bases fuertes y débiles. Ácidos y bases conjugados. Reacciones redox. Igualación de reacciones redox en medios ácido y básico.

#### Parte II: Estructura Atómica

- Lección 3: El Átomo de Hidrógeno. Conceptos de mecánica clásica. Ondas y partículas. Radiación electromagnética. Antecedentes históricos de la mecánica cuántica. Hipótesis de Planck, Einstein y de Broglie. Dualidad onda-partícula. Espectros atómicos. Modelos del átomo. Descripción mecanocuántica del átomo de hidrógeno. Orbitales hidrogenoides. Números cuánticos. Cuantización de la energía. Degeneración energética. Representaciones de los orbitales hidrogenoides. Función de distribución radial. Spin electrónico.
- Lección 4: Átomos Polieletrónicos. El problema de varios electrones. Aproximación orbital. Principio de exclusión de Pauli. Apantallamiento electrónico y carga nuclear efectiva. Penetración de los orbitales. Configuración electrónica: principio de Aufbau. Regla de Hund. Variación periódica de las propiedades de los elementos: radios atómicos e iónicos, energía de ionización, afinidad electrónica. Electronegatividad. Propiedades magnéticas.

#### Parte III: Enlace Químico

- Lección 5: El Enlace Químico. Enlaces covalente, iónico y metálico. Tratamiento aproximado del enlace covalente: Teoría de Lewis. Estructuras de Lewis. Resonancia. Geometría molecular: teoría de repulsión de pares electrónicos de la capa de valencia (RPECV). Momento dipolar. Distancia de enlace. Energía de enlace. Tratamiento mecanocuántico del enlace químico: teoría de orbitales moleculares. Aproximación de la combinación lineal de orbitales atómicos (OM-CLOA). Moléculas diatómicas. Enlace iónico. Enlace metálico. Anexo: algunos conceptos de la teoría de enlace de valencia.
- Lección 6: Fuerzas Intermoleculares. Fuerzas intra- e intermoleculares. Origen de las fuerzas intermoleculares. Fuerzas ión-ión, ión-dipolo permanente, dipolo permanente-dipolo permanente, dipolo permanente-dipolo inducido. Fuerzas de dispersión. Enlaces de hidrógeno. Manifestación de las fuerzas intermoleculares: temperaturas de cambio de fase, solubilidad.

#### Parte IV: Estado Sólido

- Lección 7: Estado Sólido. Sólidos amorfos y cristalinos. Sistemas cristalinos. Celda elemental. Parámetros de celda. Sólidos metálicos. Tipos de empaquetamiento. Empaquetamientos compactos y no compactos. Sólidos iónicos. Estructuras cristalinas iónicas. Regla de la relación de radios. Energía reticular. Sólidos covalentes. Sólidos moleculares.

## Metodología

La asignatura utiliza tres tipos de actividades formativas: clases de teoría, clases de problemas y seminarios.

Las clases de teoría (2 h por semana) se usarán para desarrollar los contenidos teóricos de la asignatura, usando materiales de soporte allí donde fuera necesario. Este material, si fuese utilizado, estará a disposición del alumnado por adelantado en la plataforma Campus Virtual. Adicionalmente, se dispone de cierto material audiovisual para ser visionado de forma asíncrona, y que podrá ser utilizado por el profesor si lo considera oportuno de forma complementaria o substitutiva a las clases presenciales, sobretudo en los temas de repaso.

Las clases de problemas (1 h por semana) se hacen en grupo reducido. Al inicio del curso se distribuirá en la plataforma Campus Virtual una colección de problemas para todo el curso, junto con un solucionario. Conforme las clases de teoría se vayan desarrollando se procederá a resolver algunos de estos problemas de forma detallada y extensa en clase.

Se programarán seminarios a lo largo del curso. En estos seminarios se podrán llevar a cabo actividades diferentes a criterio del profesor y según los intereses mostrados por los alumnos (si los hay): sesiones de resolución de dudas, discusión de problemas o debate de textos seleccionados con alguna relevancia sobre el temario. En algunos seminarios se propondrán ejercicios que serán recogidos y corregidos y formarán parte de la nota final de la asignatura.

Nota: se reservarán 15 minutos de una clase dentro del calendario establecido por el centro o por la titulación para que el alumnado rellene las encuestas de evaluación de la actuación del profesorado y de evaluación de la asignatura o módulo.

## Actividades

Título	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
Tipo: Dirigidas			
Clases de Problemas	15	0,6	1, 2, 3, 6, 4, 5, 7, 8, 9, 11
Clases de Teoría	30	1,2	1, 2, 3, 6, 4, 5, 7, 8, 9, 11
Seminarios	6	0,24	1, 4, 5
Tipo: Supervisadas			
Realización de Problemas	24	0,96	1, 2, 3, 6, 4, 5, 7, 8, 9, 11
Tipo: Autónomas			
Estudio Personal	45	1,8	2, 3, 6, 7, 8, 9, 11

## Evaluación

La nota final de la asignatura proviene de cuatro ítems de evaluación: pruebas escritas, evidencias, cuestionarios y un ensayo. Esto es de aplicación a todos los alumnos, incluidos los que cursen de nuevo la asignatura.

- **Pruebas Escritas:** Tienen en conjunto un peso del 60% en la nota final de la asignatura. Se programarán tres exámenes a lo largo del curso, dos de ellos parciales (uno aproximadamente a mitad del curso, el otro al final, ambos con igual peso) y uno de recuperación. Los dos exámenes parciales cubrirán aproximadamente la mitad del temario cada uno mientras que el de recuperación cubre todo el temario. Para poder promediar con el resto de ítems descritos en este documento es necesario que el alumno obtenga una nota mínima de 4,0 sobre 10,0 en cada uno de los exámenes parciales. En caso de no lograr esta cualificación mínima en cualquiera de los exámenes parciales, el alumno tendrá que presentarse forzosamente al examen de recuperación, donde también se exige una nota mínima de 4,0 sobre 10,0 para poder hacer promedio con el resto de calificaciones.
- **Evidencias:** Tienen un peso del 20% en la nota final de la asignatura. A lo largo del curso se propondrán algunos ejercicios más extensos que pueden ser resueltos con el temario explicado hasta el momento. Estos ejercicios se realizarán individualmente y normalmente fuera del aula, en cuyo caso deben ser entregados dentro de un plazo fijado. El peso de cada uno de los ejercicios no es necesariamente el mismo y podrá variar en función de la complejidad de los ejercicios propuestos.
- **Seminarios:** Tienen un peso del 10% en la nota final de la asignatura. En momentos convenientes en referencia al temario se llevarán a cabo actividades de evaluación que serán publicitadas con antelación.

- Ensayo: Tiene un peso del 10% en la nota final de la asignatura. A cada alumno se le asignará un tema concreto del ámbito de la química, conectado con el temario o la ingeniería química. Los alumnos deberán realizar una recopilación de información de diversas fuentes y deberán confeccionar una memoria formal que reúna sus hallazgos. A criterio del profesor y en función de las circunstancias y del tema elegido se podrá autorizar algún trabajo en grupos reducidos. Esta actividad se propondrá en fechas próximas al final de curso para garantizar que se haya cubierto la mayor parte del temario. A discreción del profesor se podrá convocar a algunos alumnos para presentar sus resultados de forma oral y discutir su trabajo.

## Actividades de evaluación

Título	Peso	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
Ensayo	10%	15	0,6	2, 3, 4, 5, 7, 8, 9, 10
Evidencias	20%	8	0,32	1, 2, 3, 6, 4, 5, 7, 8, 9, 11
Pruebas Escritas	60%	5	0,2	1, 2, 3, 6, 4, 5, 7, 8, 9, 11
Seminarios	10%	2	0,08	1, 2, 3, 6, 7, 8, 9, 11

## Bibliografía

Cualquiera de estos dos textos:

- R. H. Petrucci, F. G. Herring, J. D. Madura, C. Bissonnette, *Química General: Principios y Aplicaciones Modernas*, Pearson, 11ª Ed, 2017, ISBN: 978-8490355336. Versión electrónica disponible en la UAB.
- R. Chang, *Fundamentos de Química*, McGraw-Hill, 2011. ISBN: 978-6071505415.

## Software

No se prevé el uso de programas informáticos especializados. Sin embargo, para visualizar estructuras moleculares o celdas elementales de sólidos cuando el uso de modelos físicos en el aula no sea conveniente o posible o para alumnos con problemas de percepción espacial, se podrán usar algunos programas para representar estructuras moleculares en el espacio (por ejemplo, JMol). En casos como éste (o cualesquiera otros que surjan) se distribuirán instrucciones en la plataforma Campus Virtual para descargar, instalar y utilizar estos programas, que serán de libre distribución (*shareware* o *freeware*).