

Titulació	Tipus	Curs
2500897 Enginyeria Química	FB	1

Professor/a de contacte

Nom: Ricard Gelabert Peiri

Correu electrònic: ricard.gelabert@uab.cat

Equip docent

Ricard Gelabert Peiri

Idiomes dels grups

Podeu consultar aquesta informació al [final](#) del document.

Prerequisits

És molt recomanable que l'alumnat 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'alumnat 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 intermoleculares 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 quantitius 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 usuals 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

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.

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 (RPECV). Moment dipolar. Distància d'enllaç. Energia d'enllaç. Tractament mecanoquàntic de l'enllaç químic: Teoria d'Orbitals Moleculares. 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 Intermoleculares. Forces intra- i intermoleculares. Origen de les forces intermoleculares. Forces ió-ió, ió-dipol permanent, dipol permanent-dipol permanent, dipol permanent-dipol induït. Forces de dispersió. Enllaços d'hidrogen. Manifestació de les forces intermoleculares: 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.

Activitats formatives i Metodologia

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Tipus: Dirigides			
Classes de Problemes	15	0,6	1, 3, 2, 4, 5, 6, 7, 8, 10, 11
Classes de Teoria	30	1,2	1, 3, 2, 4, 5, 6, 7, 8, 10, 11
Seminaris	5	0,2	1, 5, 6
Tipus: Supervisades			

Realització de Problemes	20	0,8	1, 3, 2, 4, 5, 6, 7, 8, 10, 11
Tipus: Autònomes			
Estudi Personal	45	1,8	3, 2, 4, 7, 8, 10, 11

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 avançat mitjançant la plataforma Campus Virtual. Addicionalment, es disposa de material audiovisual per visionar de forma asíncrona, què 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. 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 professorat i els interessos mostrats per l'alumnat. En alguns seminaris es proposaran exercicis que es recolliran i corregiran, i seran part de la nota del curs.

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.

Avaluació

Activitats d'avaluació continuada

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Evidències	20%	15	0,6	1, 3, 2, 4, 5, 6, 7, 8, 10, 9, 11
Exercicis Setmanals	10	10	0,4	1, 3, 2, 4, 5, 6, 7, 8, 10, 9, 11
Proves Escrites	60%	5	0,2	1, 3, 2, 4, 5, 6, 7, 8, 10, 9, 11
Seminaris	10%	5	0,2	1, 3, 2, 4, 7, 8, 10, 11

Avaluació Continuada

La nota final de l'assignatura prové de quatre ítems d'avaluació: Proves Escrites, Evidències, Exercicis Setmanals, i Seminaris

- 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 a l'assignatura: 30%) 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 mitjana amb les notes de la resta d'ítems descrits en aquesta guia docent cal que l'estudiant 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'estudiant 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 mitjana.

- 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 cobert 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.
- Exercicis Setmanals: Tenen un pes total del 10% en la nota final de l'assignatura. Amb prou antelació a cada classe de problemes l'alumnat rebrà una llista dels problemes de la col·lecció a preparar de cara a la següent classe. Arribada aquesta classe de problemes el professor en triarà un a l'atzar del llistat, el recollirà de l'alumnat present i corregirà. Aquest exercici no serà resolt a classe.
- Seminaris: Tenen un pes del 10% en la nota final de l'assignatura. En alguns dels seminaris i d'acord amb l'estat de desenvolupament del temari es faran activitats d'avaluació, que seran publicades amb antelació.

Avaluació Única

L'alumnat que s'hagi acollit a la modalitat d'avaluació única haurà de realitzar dues proves escrites el mateix dia en què l'alumnat que segueixi l'avaluació contínua fa l'examen del segon parcial:

- La primera de les proves consistirà en un examen de tot el temari teòric i de problemes de l'assignatura. La nota d'aquest examen és la seva nota de Continguts Teòrics.
- La segona de les proves serà un examen curt sobre els continguts tractats als seminaris. La nota d'aquest examen és la seva nota de Continguts de Seminaris.

Per optar a aprovar l'assignatura cal obtenir 4,0 sobre 10,0 als Continguts Teòrics i una nota final mínima de 5,0 sobre 10,0 calculada d'acord amb la següent fórmula:

$$\text{Nota Final} = (90 \times \text{Continguts Teòrics} + 10 \times \text{Continguts Seminaris}) / 100$$

Si la nota dels Continguts Teòrics no arriba a 4,0 sobre 10,0 o la Nota Final no arriba a 5,0 sobre 10,0, es disposa d'una segona oportunitat de superar l'assignatura mitjançant l'examen de recuperació que se celebrarà en la data que fixi la Coordinació de la Titulació. Aquesta prova de recuperació només permet recuperar la nota corresponent als Continguts Teòrics. La nota de Continguts dels Seminaris no és recuperable. La Nota Final es calcula amb la fórmula anterior i únicament si la nota de Continguts Teòrics és com a mínim de 4,0 sobre 10,0: si la nota de Continguts Teòrics no arriba a 4,0 sobre 10,0 no es podrà aprovar l'assignatura independentment de la nota de Continguts de Seminaris.

Condicció de "No Avaluable"

Serà considerat "No Avaluable" l'alumnat que en acabar el curs no disposi de cap nota de cap prova escrita (és a dir, d'exàmens) o disposin únicament de la nota d'una prova parcial.

Qualificació Final de l'Alumnat que no Assoleixi les Notes Mínimes per Fer Mitjana

- L'alumnat en Avaluació Continuada que havent fet els dos parcials no superi la nota mínima de 4,0 en un d'ells com a mínim, i a més, no tingui nota d'examen de recuperació no pot aprovar l'assignatura independentment de les qualificacions restants (Evidències, Exercicis i Seminaris). La nota final de l'alumnat en aquesta situació serà la *xifra més baixa* entre 3,5 i (Examen Parcial 1 + Examen Parcial 2)/2.
- L'alumnat en Avaluació Única que no arribi a 4,0 en la nota de Continguts Teòrics no pot aprovar l'assignatura independentment de la nota de Seminaris. La nota final de l'alumnat en aquesta situació serà la nota final de Continguts Teòrics exclusivament.

Qualificació de "Matrícula d'Honor"

La qualificació de Matrícula d'Honor és una qualificació regulada en quant a la quantitat atorgable per curs i assignatura. El requisit mínim (condició necessària però no suficient) és l'assoliment d'una qualificació de 9,0 o més sobre 10,0 com a nota final de l'assignatura. Malgrat s'assoleixi una nota de 9,0 o superior, la qualificació de Matrícula d'Honor només s'atorgarà si el desenvolupament ha estat excepcional.

Bibliografia

Qualsevol d'aquests dos llibres:

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

Programari

No es preveu l'ús de programari especialitzat 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 en casos de 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*).

Llista d'idiomes

Nom	Grup	Idioma	Semestre	Torn
(PAUL) Pràctiques d'aula	211	Català	primer quadrimestre	matí-mixt
(PAUL) Pràctiques d'aula	212	Català	primer quadrimestre	matí-mixt
(SEM) Seminaris	211	Català	primer quadrimestre	matí-mixt
(SEM) Seminaris	212	Català	primer quadrimestre	matí-mixt
(TE) Teoria	21	Català	primer quadrimestre	matí-mixt