

FUNDAMENTOS QUÍMICOS EN LA INGENIERÍA: PROGRAMA

a) OBJETIVOS Y CONTENIDOS

BLOQUE 1: Estequiometría

OBJETIVOS ESPECÍFICOS

1.1 Razonar cuestiones y resolver problemas básicos de Estequiometría.

CONTENIDOS

1.1: CONCEPTOS GENERALES

- Concepto de Química.
- Concepto de sustancia (elemento y compuesto) y mezcla (homogénea, heterogénea).
- Átomos, moléculas, iones, electrones, protones y neutrones.
- Tabla Periódica.
- Formulación química inorgánica elemental.

1.2: UNIDADES DE MEDIDA EN QUÍMICA

- Número de Avogadro.
- Mol, u.m.a.
- Valencia, estado de oxidación y equivalente químico.
- Masa atómica y molecular.
- Molaridad, normalidad, molalidad, fracción molar.
- % en peso, % volumen-volumen, % peso-volumen.
- Unidades del Sistema Internacional y otras unidades usuales: Conversión de unidades y análisis dimensional.

1.3: LEYES DE LA ESTEQUIOMETRÍA

- Teoría atómica de Dalton.
- Ley de las proporciones definidas (Proust).
- Ley de las proporciones múltiples (Dalton).
- Ley de los volúmenes de combinación (Gay-Lussac).
- Fórmulas químicas: Empírica, molecular.
- Composición centesimal.

1.4: LEY DE LOS GASES IDEALES

- Ley de Boyle.
- Ley de Charles y Gay-Lussac.
- Hipótesis de Avogadro.
- Ecuación de estado de los gases ideales.
- Ley de Dalton de las presiones parciales.

1.5: BALANCES DE MATERIA

- Ajuste de ecuaciones.
- Estequiometrías.
- Masa y volumen necesarios para una reacción.
- Rendimiento, riqueza, reactivo limitante.

BLOQUE 2: Termoquímica

OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- 2.1 Aplicar el primer y segundo principios de la termodinámica al estudio de las reacciones químicas.*
- 2.2 Investigar la espontaneidad de los procesos químicos.*

CONTENIDOS

2.1: TERMOQUÍMICA

- Definición.
- Procesos exotérmicos y endotérmicos.
- Primer Principio de la Termodinámica.
- Función de estado. Definición.
- Energía interna, entalpía, entalpía de formación, entalpía de reacción.
- Calorimetría. Calor específico. Capacidad calorífica.
- Ley de Hess.

2.2: ESPONTANEIDAD Y CAMBIO QUÍMICO

- Procesos reversibles e irreversibles.
- Entropía. Segundo Principio de la Termodinámica.
- Entalpía libre de Gibbs. Espontaneidad.

BLOQUE 3: Estructura de la materia

OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- 3.1 Comprender los conceptos básicos de la estructura de la materia.*
- 3.2 Comprender los fundamentos de la mecánica cuántica.*
- 3.3 Aplicar la mecánica cuántica a la determinación de espectros y fenómenos energéticos asociados.*
- 3.4 Aplicar la mecánica cuántica a la construcción de la Tabla Periódica.*

CONTENIDOS

3.1: REVISIÓN DE CONOCIMIENTOS PREVIOS

- Teoría atómica de Dalton.
- Modelo atómico de Thomson.
- Modelo atómico de Rutherford.

3.2: FUNDAMENTOS DE MECÁNICA CUÁNTICA

- Radiación electromagnética.
- Teoría cuántica de Planck.
- Efecto fotoeléctrico.
- Dualidad onda-corpúsculo.
- Principio de Incertidumbre de Heisenberg.

3.3: ESTRUCTURA ELECTRÓNICA DE LOS ÁTOMOS

- Espectros atómicos.
- Modelo atómico de Bohr.
- Ecuación de ondas para átomos monoelectrónicos.
- Átomos polielectrónicos.
- Configuraciones electrónicas.
- Tabla Periódica. Propiedades periódicas.

BLOQUE 4: Enlace químico en los materiales

OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- 4.1 Comprender la naturaleza y propiedades de los diversos tipos de enlaces.*
- 4.2 Comprender las propiedades características que confieren los enlaces a los materiales*

CONTENIDOS

4.1: GENERALIDADES

- El enlace químico.
- Tipos de enlace.
- Primeras teorías del enlace. Regla del octeto.

4.2: ENLACE COVALENTE

- Definición. Propiedades.
- Estructuras de Lewis.
- Tipos de enlace covalente.
- Resonancia.
- Polaridad de enlaces y moléculas.
- Distancias y energías de enlace.
- Teoría de repulsión de pares de electrones de la capa de valencia (TRPECV).
- Teoría de orbitales moleculares (TOM) como combinación lineal de orbitales atómicos (CLOA).
- Enlace en moléculas diatómicas del segundo período.

- Enlace en moléculas poliatómicas. Hibridación.
- Sólidos moleculares. Sólidos covalentes.

4.3: ENLACE IÓNICO

- Definición. Propiedades.
- Energía reticular. Estructuras iónicas.
- Polarizabilidad. Poder polarizante.

4.4: ENLACE METÁLICO

- Definición propiedades.
- Estructuras cristalinas de los metales.
- Teoría de Bandas.
- Semiconductores.

4.5: ENLACES INTERMOLECULARES

- Definición. Propiedades.
- Fuerzas de interacción dipolo-dipolo.
- Enlace de hidrógeno.
- Fuerzas de dispersión de London.

BLOQUE 5: Estados de agregación de la materia

OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- 5.1 Comprender los rasgos fundamentales de los estados de agregación de la materia y su relación con los enlaces intermoleculares.*
- 5.2 Calcular parámetros en redes cristalinas.*
- 5.3 Formular el comportamiento de gases ideales y reales.*
- 5.4 Aplicar la teoría al estudio de disoluciones y de sus propiedades coligativas.*

CONTENIDOS

5.1: SÓLIDOS. CRISTALOQUÍMICA

- Sólidos cristalinos. Sólidos amorfos. Propiedades.
- Estructuras sólidas cristalinas. Red de traslación. Celdilla unidad
- Sistemas cristalinos. Redes de Bravais.

5.2: GASES

- Teoría cinética de los gases.
- Ecuación de estado de los gases ideales.
- Gases reales.

5.3: LÍQUIDOS

- Propiedades generales del estado líquido.
- Tipos de disoluciones. Solubilidad. Concentraciones.
- Propiedades generales de las disoluciones.
- Propiedades coligativas.
- Diagramas temperatura-composición y presión-composición.
- Métodos de separación de compuestos.

BLOQUE 6: Cinética química

OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- 6.1 Comprender los fundamentos de la cinética química.*
- 6.2 Comprender los fundamentos de catálisis.*
- 6.3 Aplicar recursos de cinética química al estudio de procesos nucleares y geocronología.*

CONTENIDOS

6.1: CINÉTICA Y CATÁLISIS

- Introducción.
- Mecanismos de las reacciones químicas. Intermedio de reacción.
- Velocidad de reacción. Factores que afectan a la velocidad de reacción. Concentración de los reactivos. Orden de reacción. Molecularidad. Constante de velocidad. Temperatura. Ecuación de Arrhenius. Energía de activación. Factor de frecuencia.
- Teoría clásica de las colisiones.
- Teoría del complejo activado o del estado de transición. Complejo activado.
- Catalizadores.
- Ecuaciones de velocidad.

6.2: CINÉTICA DE PROCESOS NUCLEARES

- Isótopos. Núclidos.
- Estructura del núcleo. Masa del núcleo, defecto másico. Energía por nucleón.
- Radiactividad. Ajuste de reacciones nucleares. Tipos de desintegración radiactiva. Unidades de radiación.
- Estabilidad nuclear.
- Fisión nuclear. Fusión nuclear.
- Velocidades de desintegración radiactiva. Período de semidesintegración o vida media. Datación isotópica.

BLOQUE 7: Equilibrio químico

OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- 7.1 Comprender los conceptos fundamentales del equilibrio químico.*
- 7.2 Aplicar la termodinámica a la formulación del equilibrio químico y al estudio de la influencia de variables.*
- 7.3 Aplicar los principios del equilibrio a reacciones homogéneas y heterogéneas.*

CONTENIDOS

7.1: CONCEPTOS FUNDAMENTALES

- Estado de equilibrio. Procesos químicos reversibles.
- Ley del equilibrio químico. Constante de equilibrio K_{eq} .
- Características de un equilibrio químico.
- Equilibrios homogéneos y heterogéneos.
- Parámetros que afectan al equilibrio químico.

7.2: RELACIÓN TERMODINÁMICA-EQUILIBRIO

- Relación entre la constante de equilibrio y la entalpía libre de Gibbs.
- Deducción termodinámica de la ecuación de van't Hoff.

BLOQUE 8: Equilibrio iónico y ácido-base

OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- 8.1 *Comprender los fundamentos de los equilibrios iónicos.*
 8.2 *Aplicar estos recursos al estudio de equilibrios de ácidos, bases y disoluciones de sales.*
 8.3 *Aplicar estos recursos al estudio de sales poco solubles.*

CONTENIDOS

8.1: FUNDAMENTOS

- Introducción.
- Teoría de Arrhenius.

8.2: EQUILIBRIOS ÁCIDO-BASE

- Teoría de Brönsted y Lowry. Teoría de Lewis.
- Fuerzas relativas de ácidos y bases. Pares ácido-base conjugados. Anfoterismo. Constantes de acidez K_a y basicidad K_b .
- Autodisociación del H_2O . Producto iónico K_w del H_2O . Escala de pH.
- Relación entre K_a , K_b y K_w .
- Relación entre K_a o K_b y el grado de disociación α .
- Hidrólisis de sales. Constantes de hidrólisis K_h y grado de hidrólisis α_h .
- Disoluciones reguladoras (tampones).
- Valoraciones ácido-base. Indicadores.
- Ácidos polipróticos.

8.3: EQUILIBRIOS DE SOLUBILIDAD

- Solubilidad y producto de solubilidad K_{ps} .
- Disolución saturada.

- Efecto de ión común.
- Efecto salino.
- Precipitación fraccionada.
- Solubilización de un precipitado.

BLOQUE 9: Equilibrios redox

OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- 9.1 Comprender los conceptos fundamentales de los equilibrios redox*
- 9.2 Aplicar la termodinámica a las pilas y sistemas electrolíticos*
- 9.3 Comprender los fundamentos de la corrosión*
- 9.4 Realizar valoraciones redox*

CONTENIDOS

9.1: CONCEPTOS FUNDAMENTALES

- Introducción.
- Oxidación. Reducción. Reacciones de oxidación-reducción o redox.
- Oxidante. Reductor.
- Estados de oxidación.
- Pares conjugados redox. Semirreacciones.
- Ajuste de reacciones redox.

9.2: PILAS ELECTROQUÍMICAS

- Definición. Electroodos. Tipos de electroodos. Potenciales de electrodo. Electroodos de referencia. Potencial y potencial normal de una pila.
- Tabla de potenciales normales. Predicción de reacciones redox.
- Ecuación de Nernst.
- Potencial normal, entalpía libre y constante de equilibrio.
- Pilas de concentración.

9.3: APLICACIONES

- Volumetrías redox.
- Pilas y baterías de uso técnico.
- Electrólisis. Leyes de Faraday. Aplicaciones de la electrólisis. Diagramas Eh-pH.
- Corrosión.

BLOQUE 10: Química orgánica

OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- 10.1 Comprender las estructuras básicas derivadas de los diferentes tipos de enlaces de los átomos de carbono.*

10.2 Conocer los principales grupos funcionales.

10.3 Aplicar los recursos de la química al estudio de la reactividad de los diferentes grupos funcionales orgánicos.

CONTENIDOS

10.1: REVISIÓN DE CONOCIMIENTOS PREVIOS

- Formulación directa e inversa de compuestos orgánicos.

10.2: FUNDAMENTOS

- El enlace en química orgánica: Geometría de las moléculas. Distancias, ángulos y energías de enlace. Representación de moléculas orgánicas.
- Estructura espacial de cadenas carbonadas. Tipos de carbonos.
- Isomería. Isómeros. Tipos de isomería.

10.3: REACCIONES ORGÁNICAS

- Efectos electrónicos. Efecto inductivo. Efecto mesómero.
- Mecanismos e intermedios de reacción. Ruptura homolítica. Radicales libres. Ruptura heterolítica. Carbocationes y carbaniones. Estabilidad de los intermedios de reacción.
- Tipos de reacciones orgánicas. Reacciones de sustitución. Reacciones de adición. Reacciones de eliminación. Reacciones redox.

10.4: HIDROCARBUROS

- Clasificación de los hidrocarburos.
- Hidrocarburos alifáticos: alcanos, alquenos, alquinos y alicíclicos. Propiedades físicas. Reactividad.
- Hidrocarburos aromáticos. Propiedades físicas. Reactividad.

10.5: GRUPOS FUNCIONALES. PROPIEDADES FÍSICAS. REACTIVIDAD

- Halogenuros de alquilo.
- Alcoholes y fenoles.
- Éteres.
- Aldehidos y cetonas.
- Ácidos carboxílicos y derivados: halogenuros de ácido, anhídridos de ácido, ésteres y amidas.
- Nitrilos.
- Aminas.
- Nitrocompuestos.

10.6: MATERIALES POLIMÉRICOS

BLOQUE 11: Química industrial

OBJETIVOS ESPECÍFICOS

11.1 Conocer los fundamentos de los procesos de obtención de los principales materiales y productos de interés

industrial.

11.2 Conocer los efectos de contaminación directa e indirecta del medio ambiente debida a las actividades de la industria química

CONTENIDOS

11.1: INTRODUCCIÓN

- ¿Qué es la química industrial?
- Diferencias entre la química de laboratorio y la química industrial.
- Clases de industrias químicas: de base y de transformación.

11.2: MATERIAS PRIMAS PARA LA INDUSTRIA QUÍMICA

- Inorgánica: minerales, aire y agua de mar.
- Orgánica: carbón, petróleo, gas natural y biomasa.

11.3: ACTIVIDADES BÁSICAS DE LA INDUSTRIA QUÍMICA

- Extracción y procesado de materias primas:
 - a) Metalurgia: Pirometalurgia (calcinación, tostación, obtención del hierro, formación del acero), hidrometalurgia (lixiviación), electrometalurgia (electrólisis de disoluciones acuosas y sales fundidas, obtención de magnesio, aluminio y sodio, refino electrolítico del cobre).
 - b) Carboquímica.
 - c) Petroquímica.
- Preparación de productos intermedios. Síntesis de H_2SO_4 , NH_3 , HNO_3 , Na_2CO_3 (Solvay) y halógenos.
- Síntesis de productos finales.

11.4: LA INDUSTRIA QUÍMICA Y EL MEDIO AMBIENTE

BLOQUE 12: Contaminantes químicos

OBJETIVOS ESPECÍFICOS

12.1 Comprender los fenómenos básicos de la contaminación atmosférica y de aguas.

12.2 Comprender la importancia tecnológica de los factores medioambientales.

12.3 Aplicar los recursos de la química al estudio de la contaminación atmosférica y de aguas.

12.4 Comprender los fundamentos de los principales ciclos naturales de elementos químicos.

CONTENIDOS

12.1: LA ATMÓSFERA. CONTAMINACIÓN ATMOSFÉRICA

- Introducción.
- Atmósfera. Funciones, composición y regiones. Efecto invernadero. Reacciones fotoquímicas. “Agujero de ozono”.
- Tipos de contaminantes. Clasificación general de los contaminantes.
- Unidades de medida en contaminación.

- Principales contaminantes del aire: CO, hidrocarburos, NO_x (niebla fotoquímica), SO_x (lluvia ácida), partículas en suspensión.
- Remedios para la contaminación.
- Análisis de contaminantes.
- Efectos sobre el hombre y la naturaleza.

12.2: EL AGUA. CONTAMINACIÓN DEL AGUA

- Introducción.
- Ciclo hidrológico. Descomposición aeróbica y anaeróbica. Fenómeno de eutrofización.
- Recursos de agua.
- Propiedades del agua. Iones en aguas dulces y saladas.
- Contaminación del agua: Calidad del agua; clases de aguas; fuentes de contaminación; tipos de alteraciones y parámetros de calidad del agua.
- Purificación del agua: Agua dura; tipos de dureza; ablandamiento de aguas; tratamiento de residuos; desalinización.

12.3: CICLOS DE LOS ELEMENTOS EN LA NATURALEZA

- Introducción.
- Ciclos del carbono y del oxígeno.
- Ciclo del nitrógeno.
- Ciclo del fósforo.

b) BIBLIOGRAFÍA

BÁSICA

- ATKINS, P.W. *Química General*. Omega, Barcelona, 1992.
- BAILAR, J.C. et al. *Química*. Vicens Vives, Barcelona, 1985.
- BROWN, J.L. *Química. La Ciencia Central*. Prentice-Hall Hispanoamericana, Madrid, 1998.
- CHANG, R. *Química*. (4ª ed.) MacGraw-Hill, Madrid, 1999.
- MAHAN, B.H.; MYERS, E. *Química. Curso Universitario*. (4ª ed.). Addison-Wesley, Madrid, 1990.

COMPLEMENTARIA

- ALONSO GARCÍA, P. et al. *Química COU*. MacGraw-Hill, Madrid, 1990. (Bloque 1).
- GRAY, H.B.; DICKERSON, R.E. *Principios de Química*. Reverté, Barcelona, 1986. (Bloque 2).
- LEVINE, I.N. *Fisicoquímica*. (3ª ed.). MacGraw-Hill, Madrid, 1990. (Bloque 3).
- SEGAL, B.G. *Experiment and Theory*. John Wiley, Nueva York, 1989. (Bloques 4 y 5).

c) PRÁCTICAS EN GRUPOS REDUCIDOS

Nº de prácticas por curso y alumno: 14

Relación de contenidos:

Lugar de realización:

Práctica Nº 1: Operaciones básicas de laboratorio

Laboratorio

"	Nº 2: Termoquímica	Laboratorio
"	Nº 3: Espectros atómicos de emisión	Laboratorio
"	Nº 4: Estructuras cristalinas y moleculares	Laboratorio
"	Nº 5: Cambios de estados	Laboratorio
"	Nº 6: Destilación	Laboratorio
"	Nº 7: Disoluciones	Laboratorio
"	Nº 8: Cinética química	Laboratorio
"	Nº 9: Equilibrios homogéneos	Laboratorio
"	Nº 10: Valoración ácido-base	Laboratorio
"	Nº 11: Valoración redox	Laboratorio
"	Nº 12: Electroquímica	Laboratorio
"	Nº 13: Determinación de contaminantes en agua	Laboratorio
"	Nº 14: Utilización de modelos en química orgánica	Laboratorio

Nº de alumnos por grupo: 1-2

d) PROCEDIMIENTO DE EVALUACIÓN

La evaluación de teoría (preguntas cerradas y abiertas) y problemas se realizan en el examen final, dando a cada bloque de programa una ponderación proporcional al número de créditos de dicho bloque.

La evaluación del laboratorio se realizará mediante pruebas cerradas realizadas al comienzo de cada una de las prácticas. La nota del curso será la media ponderada de teoría + problemas (80%) y laboratorio (20%), siendo imprescindible superar el laboratorio para obtener la nota del curso o aprobar el examen final.