FITXA IDENTIFICATIVA

Dades de l'Assignatura	
Codi	34197
Nom	Laboratori de química física II
Cicle	Grau
Crèdits ECTS	6.0
Curs acadèmic	2017 - 2018

Titulació/titulacions

Titulació	Centre	Curs	Període
1108 - Grau de Química	Facultat de Química	3	Segon quadrimestre

Matèries

Titulació	Matèria	Caràcter
1108 - Grau de Química	7 - Química Física	Obligatòria

Coordinació

Nom	Departament
GARCIA CUESTA, INMACULADA	315 - Química Física

RESUM

El “Laboratori de química física II” és una assignatura obligatòria que s’imparteix en el sisè semestre durant el tercer curs del grau en Química.

És un laboratori que fa èmfasi en l’experimentació en termodinàmica química d’interfases, espectroscòpia, electroquímica, fotoquímica, química quàntica i cinètica química. En el laboratori s’apliquen diverses tècniques instrumentals a l’estudi de sistemes d’interès quimicofísic i s’utilitzen ordinadors per a l’estudi d’àtoms i molècules.

CONEIXEMENTS PREVIS

Relació amb altres assignatures de la mateixa titulació

No heu especificat les restriccions de matrícula amb altres assignatures del pla d'estudis.

Altres tipus de requisits

Es recomana que lestudiant tinga els coneixements previs adquirits en les assignatures de: Química física I, II i III, Laboratori de química física I, Aplicacions informàtiques en química i Matemàtiques I i II.

Coneixements bàsics de química-física relacionats amb:
Cinètica formal
Espectroscòpia
Electroquímica
Teoria cinètica de gasos
Termodinàmica de sistemes bifàsics
Química quàntica de sistemes moleculars
I coneixements generals de:
Nomenclatura química i càlculs estequiomètric

COMPETÈNCIES

1108 - Grau de Química

- Desenvolupar capacitat d'anàlisi, síntesi i raonament crític.
- Demostrar capacitat inductiva i deductiva.
- Demostrar capacitat de gestió i direcció, esperit emprenedor, iniciativa, creativitat, organització, planificació, control, lideratge, presa de decisions i negociació.
- Resoldre problemes de forma efectiva.
- Demostrar capacitat de treball en equip incloent equips de caràcter interdisciplinari i en un context internacional.
- Demostrar habilitat per a transmetre informació, idees, problemes i solucions tant a un public especialitzat com no especialitzat i utilitzant si escau les tecnologies de la informació.
- Comprometre's amb l'ètica, els valors d'igualtat i la responsabilitat social com a ciutadà i com professional.
- Aprendre de forma autònoma.
- Demostrar capacitat per a adaptar-se a situacions noves.
- Adquirir una sensibilitat permanent per la qualitat i el medi ambient, el desenvolupament sostenible i la prevenció de riscos laborals.
- Demostrar que coneix els aspectes principals de terminologia química, nomenclatura, convenis i unitats.

- Interpretar la variació de les propietats característiques dels elements químics segons la taula periòdica.
- Demostrar que coneix les característiques i el comportament dels diferents estats de la matèria i les teories usades per descriure'ls.
- Demostrar que coneix els tipus principals de reacció química i les seues característiques principals associades.
- Demostrar que coneix els principis de la mecànica quàntica i l'aplicació a la descripció de l'estructura i de les propietats d'àtoms i molècules.
- Demostrar que coneix els principis de termodinàmica i cinètica i les seues aplicacions en química.
- Relacionar les propietats macroscòpiques i propietats d'àtoms i molècules individuals, incloent-hi macromolècules (naturals i sintètiques), polímers, col·loides i altres materials.
- Demostrar el coneixement i la comprensió dels fets essencials, dels conceptes, dels principis i de les teories relacionades amb les àrees de la química.
- Resoldre problemes qualitatius i quantitatius segons models desenvolupats prèviament.
- Reconèixer i analitzar problemes nous i planejar estratègies per solucionar-los.
- Avaluar, interpretar i sintetitzar les dades i la informació Química.
- Manipular amb seguretat els productes químics.
- Manejar la instrumentació química utilitzada en les diferents àrees de la Química.
- Interpretar les dades procedents d'observacions i mesures en el laboratori en termes de la seua significació i de les teories que la sustenten.
- Relacionar teoria i experimentació.
- Reconèixer i valorar els processos químics en la vida diària.
- Comprendre els aspectes qualitatius i quantitatius dels problemes químics.
- Desenvolupar metodologies sostenibles i respectuoses amb el medi ambient.
- Relacionar la química amb altres disciplines.
- Que els estudiants sàpien aplicar els seus coneixements al seu treball o vocació d'una forma professional i posseïsquen les competències que solen demostrar-se per mitjà de l'elaboració i defensa d'arguments i la resolució de problemes dins de la seua àrea d'estudi.
- Que els estudiants tinguen la capacitat d'arreplegar i interpretar dades rellevants (normalment dins de la seua àrea d'estudi) per emetre judicis que incloguen una reflexió sobre temes rellevants d'índole social, científica o ètica.
- Que els estudiants puguen transmetre informació, idees, problemes i solucions a un públic tant especialitzat com no especialitzat.
- Que els estudiants hagen desenvolupat aquelles habilitats d'aprenentatge necessàries per a emprendre estudis posteriors amb un alt grau d'autonomia.

- Expressar-se correctament, tant en forma oral com escrita, en qualsevol de les llengües oficials de la Comunitat Valenciana.
- Posseir habilitats bàsiques en tecnologies de la informació i comunicació i gestionar adequadament la informació obtinguda.

RESULTATS DE L'APRENENTATGE

En aquesta assignatura s'abordaran els resultats d'aprenentatge següents inclosos en el document de grau dins la matèria Química física. Aquests resultats han de permetre que al final de l'assignatura el l'estudiant/a ha de ser capaç de:

1. Demostrar capacitat per definir l'estat d'un sistema químic en funció de les seues propietats macroscòpiques i analitzar-ne l'evolució espontània.

2. Demostrar capacitat per comprendre i predir el comportament i reactivitat d'àtoms i molècules a partir de l'anàlisi de la seua estructura, que podrà determinar-se a partir de dades espectroscòpiques.

3. Comprendre i utilitzar eficaçment la informació bibliogràfica i tècnica referida als fenòmens fisicoquímics.

4. Realitzar eficaçment les tasques assignades com membre d'un equip i amb perspectiva de gènere.

5. Resoldre problemes amb rigor.

6. Demostrar adaptació a noves situacions.

7. Demostrar capacitat d'anàlisi i síntesi.

8. Demostrar capacitat inductiva i deductiva.

9. Demostrar capacitat d'organització i planificació.

10. Demostrar lideratge i amb perspectiva de gènere.

11. Demostrar destresa en el maneig de les principals tècniques instrumentals empleades en química i poder determinar a través del treball experimental les propietats estructurals, termodinàmiques, i el comportament cinètic dels sistemes químics.

12. Demostrar destresa en el tractament i propagació d'errors de les magnituds mesures en el laboratori i destresa en el maneig de programes informàtics per realitzar el tractament de dades experimentals.

13. Demostrar destresa en el maneig de programes informàtics de càlcul de propietats microscòpiques de la matèria, i de programes de simulació d'aquelles tècniques que pel seu alt cost no és possible tenir en el laboratori.

14. Demostrar capacitat per elaborar una memòria d'una pràctica de laboratori i un quadern corresponent a un diari de laboratori amb rigor.

15. Escriure i exposar en les llengües natives amb correcció.

16. Gestionar la informació amb rigor.

17. Demostrar compromís ètic i amb perspectiva de gènere.

DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

1. Estudi duna reacció oscil·lant: la reacció de Belousov-Zhabotinskii

La pràctica mostra lexistència doscil·lacions en la concentració dalgunes espècies intermèdies que participen en la reacció fent ús de mesures de FEM. També es mostra la formació de figures espaciotemporals i sanalitza un model de mecanisme de reacció que reprodueix adequadament les oscil·lacions.

2. Voltamperometria de ferricianur de potassi en dissolució aquosa de clorur de potassi

Sestudia el comportament electroquímic de lanió ferricianur en dissolució de clorur de potassi mitjançant les tècniques de voltamperometria cíclica descombratge lineal i potenciometria.

3. Espectroscòpia de fluorescència. Estudi de l'efecte de lestructura molecular en la capacitat fluorescent de colorants i de la transferència d'energia de molècules excitades de riboflavina

En la primera part de la pràctica sobté l'espectre de fluorescència, absorció i excitació d'una sèrie de colorants de la mateixa família i es relaciona la intensitat de fluorescència amb l'estructura molecular. En la segona part s'estudia la transferència d'energia des d'una molècula excitada (riboflavina) a una altra de no excitada (KI).

4. Determinació de la tensió superficial de mescles hidroalcohòliques

Mesura de la tensió superficial de mescles binàries d'un alcohol i aigua. S'estableix una equació que relaciona la tensió superficial amb la concentració d'alcohol en dissolucions aquoses i que permet la determinació de la concentració superficial dexcés del component orgànic.

5. Estudi cinètic de l'oxidació fotoquímica de la trifenilfosfina

Estudi cinètic d'aquesta reacció fotoquímica al medi orgànic mesurant la fracció romanent de trifenilfosfina mitjançant cromatografia HPLC de fase reversa.

6. Teoria cinètica de gasos. Mesura de la viscositat d'un gas, estimació del diàmetre molecular i determinació de la massa molecular

S'estima el diàmetre i la massa molecular de dos gasos a partir de la viscositat i la massa, fent ús de la teoria cinètica de gasos.

7. Càlculs quimicoquàntics I. Estructures geomètrica i electrònica

La pràctica introdueix els principals mètodes de càlculs semiempírics. Els mètodes s'apliquen a un conjunt de molècules representatives de la família dels alcans, alquens i sistemes aromàtics.

8. Càlculs quimicoquàntics II. Espectres electrònics

En la pràctica s'estudia l'estructura geomètrica i electrònica i es calculen els espectres d'absorció i d'emissió de la molècula de lumiflavina.

9. Estudi de sistemes electrònics amb el mètode de Hückel

L'objectiu de la pràctica és familiaritzar els estudiants amb el model d'orbitals moleculars construïts com a combinació lineal d'orbitals atòmics (OM-CLOA). S'utilitzarà el mètode d'OM més simple de tots, el mètode de Hückel.

10. Modelització molecular: estructura i reactivitat

L'objecte de la pràctica és que els alumnes es familiaritzen amb els conceptes següents: superfície de potencial, mínim local, mínim global, punt de sella, barrera de potencial, optimització de la geometria, coordenades internes, camp de forces i mecànica molecular.

11. L'actinòmetre de Parker

Muntatge i calibratge d'un actinòmetre ferrioxàlic o de Parker.

VOLUM DE TREBALL

ACTIVITAT	Hores	% Presencial
Pràctiques en laboratori	48,00	100
Tutories reglades	12,00	100
Elaboració de treballs en grup	6,00	0
Elaboració de treballs individuals	20,00	0
Estudi i treball autònom	24,00	0
Lectures de material complementari	6,00	0
Preparació d'activitats d'avaluació	20,00	0
Preparació de classes pràctiques i de problemes	14,00	0
TOTAL	**150,00**	

METODOLOGIA DOCENT

L’assignatura es desenvoluparà mitjançant aquestes metodologies docents:

- classes expositives
- classes pràctiques
- tractament de dades, càlculs i resolució de qüestions
- cerca d’informació

Els estudiants disposaran amb temps dels guions de cadascuna de les pràctiques, que podran descarregar de la pàgina web dels laboratoris docents del Departament de Química Física. Hi trobaran informació general de la manera de treballar al laboratori, material didàctic i enllaços d'interès que podran consultar en qualsevol moment.

Cada estudiant ha de fer 60 hores presencials en les dates i l'horari fixats en l'oferta de curs acadèmic (OCA). Durant aquest temps es realitzaran aquestes activitats docents: 6 pràctiques, 2 sessions dedicades a seminaris, treballs i activitats relacionades amb l'adquisició de competències transversals i 1 examen, tot això distribuït en 15 sessions de 4 hores cadascuna.

Les pràctiques s'organitzen de dos en dos i es dediquen 4 sessions a cadascun dels grups de dues pràctiques segons l'esquema següent:

1a sessió: explicació de les dues pràctiques

2a sessió: realització de la primera de les pràctiques

3a sessió: realització de la segona

4a Sessió: Sessió de càlculs i qüestions d'ambdues pràctiques a l'aula d'informàtica

Les sis pràctiques programades es realitzen en dotze sessions. Dues sessions més es dediquen a seminaris i en l'última es realitza l'examen de l'assignatura.

El desenvolupament de l'assignatura s'estructura entorn dels eixos següents:

1. Preparació de la pràctica

Cada pràctica té uns objectius concrets que són especificats en el text del guió, així com la bibliografia necessària per preparar-les. Els estudiants han d'estudiar el contingut dels guions abans del començament de cada sessió, preparar un esquema del procediment experimental i realitzar les qüestions prèvies i els càlculs necessaris per realitzar a terme l'experiència.

2. Treball experimental

Les experiències es fan en parella i en alguns casos es comparteixen els resultats obtinguts per diferents parelles, cosa que ajuda a potenciar el treball en equip.

L'elaboració del quadern de treball al mateix temps que es realitza la pràctica és part important del treball de laboratori.

3. Tractament dels resultats obtinguts

El tractament de resultats s'iniciarà al laboratori. L'estudiant no ha de limitar-se a calcular sinó que ha d'analitzar els resultats experimentals obtinguts al laboratori així com els càlculs previs, i expressar els resultats amb les unitats i xifres significatives adients. Per tant, aquesta etapa vol desenvolupar la capacitat d'anàlisi de l'estudiant.

4. Quadern de treball de laboratori

L'estudiant ha de dur el quadern de laboratori al dia. El professor revisa periòdicament aquest quadern i l'estudiant l'ha de presentar en acabar l'assignatura en el termini fixat pel professor.

5. Memòria d'una de les experiències realitzades

Un dels objectius d'aquesta assignatura és que l'alumne es familiaritze amb la presentació d'un treball científic, per això cada alumne i alumna ha de presentar una memòria. Aquest treball s'ha d'elaborar individualment i presentar en el termini que el professor fixe. El professor indicarà a cada alumne i alumna la memòria que ha d'elaborar.

6. Seminari

S'instruirà els estudiants sobre la cerca d'informació bibliogràfica i la utilització de bases de dades. Es discutiran els resultats i procediments de les pràctiques realitzades.

AVALUACIÓ

L'assistència a totes les sessions de pràctiques és obligatòria. Per superar l'assignatura, l'estudiant ha d'assistir, almenys, al 90% de les sessions de laboratori i seminari. L'avaluació de l'aprenentatge és individual i es realitzarà d'acord amb els criteris següents:

1. Avaluació continua de cada alumne i alumna, basada en les activitats presencials, participació i grau d'implicació en el procés d'ensenyament-aprenentatge durant les sessions de laboratori: actitud, habilitats adquirides i quadern de laboratori: 30% de la nota global.

2. Proves teoricopràctiques consistents en exàmens orals i/o escrits que constaran tant de qüestions teoricopràctiques com de problemes: 40% de la nota global.

3. Presentació dels resultats obtinguts: informes, memòries i/o comunicació oral: 30% de la nota global.

PRIMERA CONVOCATÒRIA

L'avaluació es realitzarà mitjançant la mitjana ponderada dels tres sistemes d'avaluació indicats. Per superar l'assignatura, cal obtenir una qualificació mitjana mínima de 5.0 i en cadascun dels apartats s'ha d'aconseguir una puntuació mínima de 4.0 punts sobre 10.

SEGONA CONVOCATÒRIA

A la segona convocatòria només es podrà recuperar les proves teoricopràctiques i la presentació dels resultats, és a dir, l'examen i la memòria.

L'avaluació es durà a terme seguint els criteris de ponderació indicats a la primera convocatòria.

NOTA: Aquesta assignatura queda exclosa de la regulació d´avançament de convocatòria per a la finalització dels estudis de grau (acord de la CAT, de 26 de març de 2015).

REFERÈNCIES

Bàsiques

- SHOEMAKER, D.P., GARLAND, C.W. y NIBLER, J.W. Experiments in Physical Chemistry. 6ª ed. McGraw-Hill. New York, 1996. ISBN 0070570744

RUIZ SANCHEZ, J.J., RODRIGUEZ MELLADO, J.M., MUÑOZ GUTIERREZ, E. y SEVILLA SUAREZ DE URBINA, J.M. Curso experimental en Química Física. Ed. Síntesis. 2003. ISBN 8497561287

MATTHEWS, G.P. Experiments in Physical Chemistry. 4ª ed. Clarendon Press. Oxford, 1985. ISBN 0198552122

DANIELS, F., ALBERTY, R.A., WILLIAMS, J.W., CORNWELL, C.D., BENDER, P. y ARRIMAN, J.E. Curso de Fisicoquímica experimental. McGraw-Hill de México, 1972.

CROCKFORD, H.D., NOVELL, J.W., BAIRD, H.W. y GETZEN, F.W. Manual de laboratorio de Química Física. Ed. Alambra, S.A. 1961.

ROSE, J. Experimentos de Química Física Superior. Ed. Acribia, Zaragoza, 1966.

WILSON, J.M., NEWCOMBE, R.J., DENARO, A.R. y RICKETT, R.M.W. Prácticas de Química Física. Ed Acribia. Zaragoza. 1966.

BILLO, E.J. Excel for Chemists. A Comprehensive Guide. 3rd Edition. John Wiley & Sons. 2011. ISBN 978-0470381236

Complementàries

- SPIRIDONOV, V.P. y LOPATKIN, A.A. Tratamiento Matemático de Datos Fisicoquímicos. Ed. Mir. Moscú, 1983. ISBN 8440109709

GIAMBERARDINO, V. Teoria de los Errores. Ed. Reverté. Venezolana S.A.

ATKINS, P.W. y DE PAULA, J. Química Física. 8ª ed. Ed. Médica Panamericana, México. 2008. ISBN 9789500612487

LEVINE, I.N. Físico Química. 5ªed. McGraw-Hill. Madrid. 2004. ISBN 9788448137861 (v. 1) 9788448137878 (v. 2)

BERTRAN, J. y NUÑEZ, J. (coord.) Química Física. Ariel. Barcelona. 2002. ISBN 9788434480483(v.1) 9788434480490(v.2)