

**FITXA IDENTIFICATIVA****Dades de l'Assignatura**

Codi	34197
Nom	Laboratori de química física II
Cicle	Grau
Crèdits ECTS	6.0
Curs acadèmic	2018 - 2019

Titulació/titulacions

Titulació	Centre	Curs	Període
1110 - Grau de Química V2-2018	Facultat de Química	3	Segon quadrimestre

Matèries

Titulació	Matèria	Caràcter
1110 - Grau de Química V2-2018	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 de interfases, espectroscòpia, electroquímica, fotoquímica, química quàntica i cinètica química. En el laboratori, s'apliquen diverses tècniques instrumentals a l'estudi de sistemes d'interès químic-físic i s'utilitzen ordinadors per a l'estudi d'àtoms i molècules.

CONEIXEMENTS PREVIS**Relació amb altres assignatures de la mateixa titulació****1108 - Grau de Química V1-2009 :**

R5-OBLIGACIÓ DE CURSAR SIMULTÀNIAMENT L'ASSIGNATURA

34195 - Química física III

36451 - Química Física II

1110 - Grau de Química V2-2018 :

34195 - Química física III

36451 - Química Física II



Altres tipus de requisits

Es recomana que l'estudiant 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.

Y coneixements generals de:

- Nomenclatura química i càlculs estequiomètrics.
- Preparació de dissolucions.
- Equilibri en dissolució.
- Logaritmes, exponencials, derivades, integrals i estadística.
- Informàtica.
- Maneig de material de laboratori.

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 públic 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 qualitius i quantitius 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 qualitius i quantitius dels problemes químics.
- Desenvolupar metodologies sostenibles i respectuoses amb el medi ambient.
- Relacionar la química amb altres disciplines.
- Que els estudiants sàprien 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'aplegar 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'APRENTATGE

En aquesta assignatura s'abordaran els següents resultats d'aprenentatge continguts en el document de Grau dins de la matèria Química Física. Aquests resultats han de permetre que al final de l'assignatura el la/estudianta ha de ser capaç de:

1. Demostrar capacitat per a definir l'estat d'un sistema químic en funció de les seues propietats macroscòpiques, i analitzar l'evolució espontània del mateix.
2. Demostrar capacitat per a 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 físic-químics.
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 emprades 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 amidades en el laboratori i destresa en el maneig de programes informàtics per a portar a terme 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 a 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.

Finalment,

Demostrar una conducta ètica i responsable en l'exercici del seu treball professional, valors que són transmesos pels docents i investigadors de la Universitat, com a generadora i transmissora del coneixement científic.

DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

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

La pràctica mostra l'existència d'oscil·lacions en la concentració d'algunes espècies intermèdies que participen en la reacció fent ús de mesures de FEM. També es mostra la formació de figures espaciotemporals i s'analiza un model de mecanisme de reacció que reproduïx adequadament les oscil·lacions.

2. Estudi potenciomètric i voltamperomètric del parell ferricianur/ferrocianur en dissolució aquosa de clorur de potassi.



S'estudia el comportament electroquímic de l'anió ferricianur en dissolució de clorur de potassi mitjançant les tècniques de voltamperometria cíclica d'escombratge lineal i potenciometria.

3. Espectroscòpia de fluorescència. Estudi de l'efecte de l'estructura 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 s'obté 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 (IK).

4. Determinació de la tensió superficial de mesclures hidroalcohòliques

Mesura de la tensió superficial de mesclures 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 d'excess 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 Químic-Quàntics: I-Estructures geomètrica i electrònica. II-Espectres electrònics.

La pràctica introdueix els principals mètodes de càlculs semi-empírics. Els mètodes s'apliquen a un conjunt de molècules representatives de la família dels alcans, alquens i sistemes aromàtics. En la pràctica, s'estudia l'estructura geomètrica i electrònica i es calculen els espectres d'absorció.

8. 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.

9. 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.

**10. 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 les següents metodologies docents:

- classes expositives
- classes pràctiques
- tractament de dades, càlculs i resolució de qüestions
- Cerca d'informació

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

Cada estudiant realitzarà 60 hores presencials en les dates i horari fixats en l'Oferta de Curs Acadèmic (OCA). Durant aquest temps es duran a terme les següents 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 dues en dues, dedicant-se 4 sessions a cadascun dels grups de dues pràctiques segons el següent esquema:

1^a sessió: Explicació de les dues pràctiques.

2^a sessió: Realització de la primera de les pràctiques.

3^a sessió: Realització de la segona.



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

Les sis pràctiques programades es realitzaran en dotze sessions. Dos sessions més es dedicaran a seminaris i en l'última es realitzarà 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 vénen especificats en el text del guió, així com la bibliografia necessària per preparar-les. Els estudiants hauran 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 poder dur 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 χ els càlculs previs i expressar els resultats amb les unitats i xifres significatives adients. Per tant, aquesta etapa pretén 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 revisarà periòdicament aquest quadern, i l'estudiant el presentarà al finalitzar 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 presentarà una memòria. Aquest treball s'ha d'elaborar individualment i es presentarà en el termini que el professor fixe. El professor indicarà a cada alumne la memòria que ha d'elaborar.

6.- Seminari

S'instruirà als estudiants sobre la recerca 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 a poder superar l'assignatura l'estudiant haurà d'assistir-hi almenys al 90% de les sessions de laboratori i seminari. L'avaluació de l'aprenentatge serà individual i es realitzarà d'acord amb els següents criteris:

1. Avaluació continua de cada alumne, 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 teòric-pràctiques consistents en exàmens orals i/o escrits que constaran tant de qüestions teòric-pràctiques 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 a superar l'assignatura és necessari obtenir una qualificació mitjana mínima de 5.0 i en cadascun dels apartats s'haurà d'aconseguir una puntuació mínima de 4.0 punts sobre 10.

SEGONA CONVOCATÒRIA

A la segona convocatòria només es podrà recuperar les proves teòric-pràctiques 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.

REFERÈNCIES

Bàsiques

- SHOEMAKER, D.P., GARLAND, C.W. y NIBLER, J.W. Experiments in Physical Chemistry. 6^a 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. 4^a 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
- Compromiso ético con el Código Europeo de conducta
http://ec.europa.eu/research/participants/data/ref/h2020/other/hi/h2020-ethics_code-of-conduct_en.pdf



Complementàries

- SPIRIDONOV, V.P. y LOPATKIN, A.A. Tratamiento Matemático de Datos Físicoquímicos. Ed. Mir. Moscú, 1983. ISBN 8440109709
- 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)
- TAYLOR, J.R. An Introduction to Error Analysis. The study of uncertainties in physical measurements, 2ª ed. Ed. University Science Books, Saualito. 1982. ISBN 0-935702-75-X.