

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

<b>Codi</b>	36597
<b>Nom</b>	Laboratori de Química Física
<b>Cicle</b>	Grau
<b>Crèdits ECTS</b>	6.0
<b>Curs acadèmic</b>	2024 - 2025

**Titulació/titulacions**

<b>Titulació</b>	<b>Centre</b>	<b>Curs</b>	<b>Període</b>
1929 - Doble Grau Física i Química	Doble Grau en Física i Química	5	Segon quadrimestre

**Matèries**

<b>Titulació</b>	<b>Matèria</b>	<b>Caràcter</b>
1929 - Doble Grau Física i Química	5 - Cinquè Curs (Obligatori)	Obligatòria

**Coordinació**

<b>Nom</b>	<b>Departament</b>
PEREZ PLA, FRANCISCO	315 - Química Física

**RESUM**

El Laboratori de Química Física és una assignatura obligatòria que s'imparteix durant el segon semestre del cinquè curs del doble grau en Química i Física. En l'assignatura, s'adquireixen coneixements i habilitats relacionats amb l'experimentació en les següents parts de la Química Física: Espectroscòpia, Electroquímica, Fotoquímica, Química Teòrica i Cinètica Química. Durant les classes de laboratori, s'apliquen diverses tècniques instrumentals a l'estudi de sistemes d'interés químic-físic i es realitzen càlculs mecano-quàntics orientats a l'estudi d'àtoms i molècules amb ordinadors personals.

**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**

R5-OBLIGACIÓ DE CURSAR SIMULTÀNIAMENT L'ASSIGNATURA:

36596 Elements de Química Física.

Es recomana que l'estudiant posseïssa els coneixements bàsics de nomenclatura química i càlcul numèric, i coneixements de Química-Física relacionats amb:

- Cinètica formal.
- Espectroscòpia.
- Electroquímica.
- Fotoquímica.
- Cinètica Química.
- Química Quàntica de sistemes moleculars.

**COMPETÈNCIES (RD 1393/2007) // RESULTATS DE L'APRENTATGE (RD 822/2021)****RESULTATS D'APRENTATGE (RD 1393/2007) // SENSE CONTINGUT (RD 822/2021)**

L'apartat anterior recull les competències contingudes en el document VERIFICA. En aquesta assignatura s'aborden part dels resultats d'aprenentatge de la matèria Laboratori de Química Física II que permeten adquirir, tant coneixements específics de Química, com a habilitats i competències cognitives i competències generals recomanades per la EUROPEAN CHEMISTRY THEMATIC NETWORK (ECTN) for the Chemistry Eurobachelor® Label. En la següent taula es relacionen els resultats d'aprenentatge adquirits en l'assignatura de Laboratori de Química Física II relacionats amb les competències del grau en Química.

**CONEIXEMENTS ESPECÍFICS DE QUÍMICA**

El procés d'aprenentatge ha de permetre als titulats de grau demostrar:

Competències de l'assignatura Laboratori de Química Física que contempen els resultats d'aprenentatge EUROBACHELOR®

Les principals tècniques de la investigació d'estructures incloent l'espectroscòpia.

Demostrar que reconeix els elements químics i els seus compostos: Obtenició, estructura, reactivitat, propietats i aplicacions (CE7).



Manejar la instrumentació química utilitzada en les diferents àrees de la Química (CE19).

Demostrar que coneix els principis, procediments i tècniques per a la determinació, separació, identificació i caracterització de compostos químics. (CE8).

Les característiques dels diferents estats de la matèria i les teories utilitzades per a descriure'ls.

Demostrar que coneix les característiques i comportament dels diferents estats de la matèria i les teories emprades per a descriure'ls (CE3).

Els principis de la termodinàmica i la seua aplicació a la química. Demostrar que coneix els principis de termodinàmica i cinètica i les seues aplicacions en Química (CE6).

Los principios de la mecánica cuántica y su aplicación a la descripción de la estructura y propiedades de los átomos y moléculas.

Demostrar que coneix els principis de la Mecànica Quàntica i la seua aplicació a la descripció de l'estructura i propietats d'àtoms i molècules (CE5).

## COMPETÈNCIES I HABILITATS RELACIONADES AMB LA PRÀCTICA DE LA QUÍMICA

El procés d'aprenentatge ha de permetre als titulats de grau demostrar:

Competències del títol de grau que contemplen els resultats d'aprenentatge EUROBACHELOR®

Capacitats per a manejar productes químics de manera segura, tenint en compte les seues propietats físiques i químiques, incloent-hi qualsevol risc associat al seu ús.

Manipular amb seguretat els productes químics (CE17).

Valorar els riscos en l'ús de substàncies químiques i procediments de laboratori (CE21).

Capacitats per a monitorar, observar i mesurar les propietats químiques, fets o canvis, i realitzar el seu



registre (recollida) i documentació de manera sistemàtica i fiable.

Manejar la instrumentació química utilitzada en les diferents àrees de la Química (CE19).

Relacionar teoria i experimentació (CE22).

Reconèixer i valorar els processos químics en la vida diària (CE23).

Comprendre els aspectes qualitius i quantitius dels problemes químics (CE24).

Capacitat per a interpretar dades derivades de les observacions i mesures de laboratori en termes de la seua rellevància, i relacionar-los amb la teoria adequada.

Interpretar les dades procedents d'observacions i mesures en el laboratori en termes de la seua significació i de les teories que la sustenten (CE20).

Relacionar teoria i experimentació (CE22).

Reconèixer i valorar els processos químics en la vida diària (CE23).

Comprendre els aspectes qualitius i quantitius dels problemes químics (CE24).

Relacionar la Química amb altres disciplines (CE26).

Capacitat per a realitzar avaluacions del risc de l'ús de substàncies químiques i procediments de laboratori.

Comprendre els aspectes qualitius i quantitius dels problemes químics (CE24).



Desenvolupar metodologies sostenibles i respectuoses amb el medi ambient (CE25).

Valorar els riscos en l'ús de substàncies químiques i procediments de laboratori (CE21).

### COMPETÈNCIES GENERALS

El procés d'aprenentatge ha de permetre als titulats de grau demostrar:

Competències del títol de grau que contemplen els resultats d'aprenentatge EUROBACHELOR®

Capacitats de càlcul i aritmètiques, incloent-hi aspectes com ara error d'anàlisi, estimacions d'ordres de magnitud, i ús correcte de les unitats.

Desarrollar capacidad de análisis, síntesis y razonamiento crítico (CG1).

Demostrar capacidad inductiva y deductiva (CG2).

Resolver problemas de forma efectiva (CG4).

Competències de gestió de la informació, en relació a fonts primàries i secundàries, incloent-hi recuperació d'informació a través de cerques en línia

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 (CG6).

Posseir habilitats bàsiques en tecnologies de la informació i comunicació i gestionar adequadament la informació obtinguda (CT2).

Capacitat d'adaptar-se a noves situacions i prendre decisions.

Demostrar capacitat per a adaptar-se a noves situacions (CG9).

Reconéixer i analitzar nous problemes i planejar estratègies per a solucionar-los (CE15).



Habilitats relacionades amb la tecnologia de la informació com ara processador de textos, full de càlcul, registre i emmagatzematge de dades, ús d'internet relacionada amb les assignatures.

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 (CG6).

Posseir habilitats bàsiques en tecnologies de la informació i comunicació i gestionar adequadament la informació obtinguda (CT2).

Compromís ètic amb el Codi Europeu de conducta: Adquirir una sensibilitat permanent per la qualitat i el medi ambient, el desenvolupament sostenible i la prevenció de riscos laborals (CG10).

Comprometre's amb l'ètica, els valors d'igualtat i la responsabilitat social com a ciutadà i com a professional (CG7).

En relació amb els Objectius de Desenvolupament Sostenible (ODS's) en aquesta assignatura s'espera que els/as estudiants siguin capaços de saber aplicar els coneixements apresos per a contribuir a garantir una educació inclusiva, equitativa i de qualitat i promoure oportunitats d'aprenentatge (ODS 4), i adquirir una sensibilitat especial per una gestió sostenible de l'aigua (ODS 6), de les matèries primeres i de les fonts d'energia (ODS 7) així com per un desenvolupament sostenible i compatible amb el medi ambient (ODS 11, 12, 13, 14 i 15). També, dissenyar, seleccionar i/o desenvolupar productes i processos químics eficients (ODS 7) i que minimitzen el seu impacte sobre el medi ambient (ODS 14 i 15), aprofiten matèries primeres alternatives i generen una menor quantitat de residus (ODS 11).

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 estudiant siga 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 d'aquest.
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 fisicoquímics.



4. Realitzar eficaçment les tasques assignades com a 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 mesurades en el laboratori i destresa en el maneig de programes informàtics per a dur 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 tindre 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.
18. 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 d'una reacció oscil·lant: La reacció de Belousov-Zhabotinski.

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 f.e.m. També es mostra la formació de figures espaciotemporals i s'analitza un model de mecanisme de reacció que reproduïx adequadament les oscil·lacions.

**2. Estudi potenciomètric i voltamperomètric del parell ferricianuro/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**

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

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, s'estudia la transferència d'energia des d'una molècula excitada (riboflavina) a una altra no excitada (IK).

**4. Estudi cinètic de l'oxidació fotoquímica de la trifenilfosfina.**

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

**5. Estudi cinètic de la reacció entre el iode i l'acetona.**

Es determina la llei de velocitat de la reacció entre el iode i l'acetona catalitzada per àcid. Se segueix la cinètica respecte al iode, determinant la seua concentració valorant mostres de reacció amb tiosulfat. Els ordres respecte a l'acetona i a l'àcid es determinen realitzant l'experiència per a diferents concentracions d'acetona i d'àcid.

**6. Càlculs Químic-Quàntics: I-Estructures geomètrica i electrònica. II-Espectres electrònics.**

La pràctica introdueix els principals mètodes de càlcul 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.

**VOLUM DE TREBALL**

ACTIVITAT	Hores	% Presencial
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
<b>TOTAL</b>	<b>90,00</b>	

**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 alumnes disposaran amb antelació dels guions de cadascuna de les pràctiques, que podran descarregar en la pàgina web dels laboratoris docents del Departament de Química Física. Allí trobaran informació general del mode de treball en el laboratori, material didàctic i enllaços d'interés que podran consultar en qualsevol moment.

L'assignatura inclou 60 hores presencials distribuïdes en 15 sessions de 4 hores cadascuna. Es realitzaran 6 pràctiques i 4 seminaris, que es dedicaran a activitats relacionades amb l'adquisició de competències transversals.

Les pràctiques s'organitzen de dues en dues, dedicant-se 4 sessions a cadascun dels grups de dues pràctiques segons el següent esquema:

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 de totes dues pràctiques a l'aula d'informàtica.

Les sis pràctiques programades es realitzaran en dotze sessions. Tres sessions més es dedicaran a seminaris.



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

#### 1.- Preparació de la pràctica.

Cada pràctica té uns objectius concrets que venen especificats en el text del guió, així com la bibliografia necessària per a preparar-les. Els alumnes 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 a 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, la qual cosa 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 en el laboratori. L'estudiant no ha de limitar-se a calcular, sinó que ha d'analitzar els resultats experimentals obtinguts en el laboratori així com els càlculs previs, i expressar els resultats amb les unitats i xifres significatives adequades. Per tant, aquesta etapa pretén desenvolupar la capacitat d'anàlisi de l'estudiant.

#### 4.- Quadern de treball de laboratori.

L'estudiant ha de portar el quadern de laboratori al dia. El professor revisarà periòdicament aquest quadern, i l'estudiant el presentarà en 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 a això cada alumne presentarà una memòria. Aquest treball s'elaborarà de manera individual i es presentarà en el termini fixat pel professor. El professor indicarà a cada alumne la memòria que ha d'elaborar.

#### 6.- Seminaris

S'instruirà als estudiants en la cerca d'informació bibliogràfica i en la utilització de bases de dades, amb la finalitat de completar els estudis experimentals duts a terme. Així mateix, es resoldran dubtes i analitzaran resultats i procediments de les pràctiques realitzades.

## AVALUACIÓ

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



1. Avaluació contínua 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. Exàmens escrits, orals i/o experimentals: 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 global mitjana mínima de 5.0 i a més, en cadascun dels apartats s'haurà d'aconseguir una puntuació mínima de 4.0 punts sobre 10.

### SEGONA CONVOCATÒRIA

En la segona convocatòria solament 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 en la primera convocatòria.

### Advertiment final

La còpia o plagi manifest de qualsevol tasca que forma part de l'avaluació suposarà la impossibilitat de superar l'assignatura, sotmetent-se seguidament als procediments disciplinaris oportuns.

Tinga's en compte que, d'acord amb l'article 13 d) de l'Estatut de l'Estudiant Universitari (RD 1791/2010, de 30 de desembre), "és deure d'un estudiant abstenir-se en la utilització o cooperació en procediments fraudulents en les proves d'avaluació, en els treballs que es realitzen o en documents oficials de la Universitat".

## 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
- 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](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 Fisicoquímicos. 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, Saulalito. 1982. ISBN 0-935702-75-X.