

**Organització.** L'assignatura Ampliació de Laboratori de Química Física és una assignatura de pràctiques computacionals que es realitzen per parelles i duren dues setmanes. Abans de cada pràctica es realitzarà una classe teòrica sobre el contingut de la pràctica. Els alumnes disposen d'un guió amb una introducció teòrica de cada pràctica i el procediment. També disposen d'un informe de cada pràctica per anotar els resultats. Les pràctiques es realitzen a l'aula d'ordinadors i distribueixen en el temps de la següent manera:

1. Mètode de Hückel (1 dia)
2. Mètode de Hartree-Fock. Conjunts de funcions de base (1 dia)
3. Espectroscòpia de vibració-rotació. Molècules diatòmiques heteronuclears (1 dia)
4. Espectroscòpia vibracional de molècules poliatòmiques (1 dia)
5. Espectroscòpia RMN de  $^{13}\text{C}$ . Càlcul de desplaçaments químics (1 dia)
6. Reactivitat química I. Reaccions de Diels-Alder (2 dies)
7. Reactivitat química II. Ciclopropanació de l'etilè per diazometà catalitzada per Pd(0) (2 dies)

Per a cada pràctica s'haurà d'entregar el informe el mateix dia al final de la pràctica. L'últim dia es realitzarà un examen curt de tipus test sobre les pràctiques i un examen pràctic.

**Professors.**

Responsable del Grup 3: Luis Rodríguez (despatx C7-127), luis@klingon.uab.es

Ajudants del Grup 3: Raquel Rios (despatx C7-149), raquelr@klingon.uab.es

**Avaluació.** La nota final serà el resultat de l'avaluació dels informes de les pràctiques (25% de la nota), el test de l'últim dia (25% de la nota) i de l'examen (50% de la nota). El test de l'últim dia consisteix en una sèrie de preguntes de resposta múltiple sobre els resultats de les pràctiques (els alumnes disposaran dels informes on anoten els resultats de cada pràctica). L'examen final serà de tipus pràctic i es farà a l'aula d'ordinadors l'últim dia de pràctiques (dia 7 d'abril).