

Experimentació i Documentació en Química

2012/2013

Codi: 102525
Crèdits ECTS: 9

Titulació	Pla	Tipus	Curs	Semestre
2502444 Graduat en Química	953 Graduat en Química	FB	1	A

Professor de contacte

Nom: Jordi Coello Bonilla
Correu electrònic: Jordi.Coello@uab.cat

Utilització d'idiomes

Llengua vehicular majoritària: català (cat)
Algun grup íntegre en anglès: No
Algun grup íntegre en català: No
Algun grup íntegre en espanyol: No

Prerequisits

En ser una assignatura de primer curs, no hi ha prerequisits acadèmics per matricular-se.

De tota manera, s'ha de tenir en compte que és una assignatura que conté una gran part de laboratori, per tant amb unes característiques especials i que exigeix una normativa particular.

El comportament al laboratori ha de seguir les Normes de Seguretat als Laboratoris Docents que publica el Departament de Química.

Abans de començar l'assignatura, els alumnes han de llegir-les i el primer dia al laboratori signen una declaració conforme ho han fet. Sense aquest document no es poden realitzar les pràctiques.

Les normes les podeu trobar i baixar en format pdf de la següent adreça:
http://dept-quimica.uab.cat/catala/cat_grau/grau_normes.asp

Durant les pràctiques, els alumnes han de dur posada la bata de laboratori i ulleres de seguretat homologades. Sense bata o ulleres no poden fer la pràctica. A més a més dels estris habituals per escriure, han de portar (i saber com funciona) una calculadora científica que pugui fer càlculs de regressió i una espàtula. És recomanable que vagin al laboratori amb un ordinador portàtil (o netbook o similar..) per fer càlculs amb Excel.

Objectius

L'objectiu final de l'assignatura és que l'alumne assoleixi les competències que estan indicades anteriorment.

La part d'experimentació al laboratori té uns objectius generals:

- Conèixer i aplicar les normes de seguretat i de treball al laboratori.
- Conèixer el sistema d'eliminació de residus al laboratori.
- Conèixer el material i estris bàsics del laboratori químic.
- Conèixer les operacions bàsiques del laboratori químic:
 - Neteja del material de vidre

- Pesada
 - Mesura i transvasament de líquids
 - Preparació de solucions
 - Escalfament de substàncies
 - Agitació
 - Evaporació
 - Cristal·lització
 - Filtrat i rentat de substàncies
 - Extracció Simple
 - Cromatografia de capa fina.
 - Destil·lació
- Ús de la llibreta de laboratori.
 - Tractament gràfic, numèric i informàtic de les dades de laboratori

Com objectius específics de cada pràctica:

Pràctica 1: Tractament de dades

- Presa de contacte amb els conceptes d'error experimental, exactitud i precisió.
- Comprendre que el material de vidre per mesurar volums pot tenir dues funcions diferents: contenir un volum exacte i transferir un volum exacte.
- Càlculs d'estadística bàsica.
- Avaluar la precisió i l'exactitud d'uns resultats.
- Introducció a l'ús d'un full de càlcul com eina per a representar resultats.
- Aprendre a pesar amb les balances següents: analítica, de precisió i granetari.
- Aprendre les tècniques volumètriques i verificarne la precisió.

Pràctica 2: Densitats.

- Preparar diferents solucions de concentració coneguda d'una sal fent servir diferents escales: molaritat, molalitat i tant per cent en pes.
- Extreure informació a partir del gràfic de concentració i densitat de la dissolució.
- Fer servir la regressió per mínims quadrats i determinar la concentració d'una solució problema a partir de la lectura del gràfic.
- Relacionar molaritat (M), molalitat (m) i tant per cent en pes (%).
- Treballar amb diferents escales de concentració.

Pràctica 3: Reaccions de precipitació. Concepte de reactiu limitant.

- Aprendre la tècnica de filtració per a la separació de fases heterogènies (sòlidlíquid).

- Observar el concepte de reactiu limitant amb un cas pràctic, tot afegint quantitats variables d'una sal soluble a la mateixa quantitat d'una altra sal soluble (la qual actuarà de reactiu limitant).
- Observar la insolubilitat d'algunes sals a partir de la mescla de sals solubles.
- Aprendre una tècnica de purificació de precipitats.

Pràctica 4: Reaccions redox. Estequiometria de les reaccions en solució aquosa.

- Utilitzar el concepte d'oxidant i reductor mitjançant l'estudi de reaccions redox simples.
- Recordar les regles d'igualació de reaccions redox tot igualant-ne.
- Demostrar el comportament diferenciat d'alguns reactius en reaccions redox depenent de si es treballa en medi àcid o en medi bàsic.
- Analitzar de forma elemental la solubilitat de les substàncies en diferents solvents.
- Fer extraccions líquid-líquid de substàncies d'un solvent a un altre de diferent polaritat.
- Determinar la concentració d'una solució problema usant una reacció redox.

Pràctica 5: Orbitals atòmics i moleculars.

- Entendre el significat de les diferents representacions dels orbitals atòmics.
- Entendre la informació que es pot extreure de la funció d'ona.
- Visualització d'orbitals moleculars de molècules diatòmiques homonuclears i heteronuclears
- Construcció de diagrames d'orbitals moleculars
- Identificació d'orbitals moleculars i en molècules planes
- Energia dels orbitals moleculars i relació amb el nombre de nodes
- Separació HOMOLUMO en molècules $C_{2n}H_{2n+2}$ ($n= 1, 2, 3$)
- Orbitals moleculars del benzè, del CO_2

Pràctica 6: Geometria molecular. Estructures cristal·lines.

- Visualitzar les formes de molècules senzilles.
- Observar l'efecte dels parells no enllaçants de l'àtom central sobre la geometria molecular.
- Observar l'efecte dels dobles enllaços sobre la geometria molecular.
- Observar l'efecte dels àtoms perifèrics sobre la geometria molecular.
- Estudiar l'estructura de metalls, sòlids iònics i sòlids covalents a partir de models moleculars i de l'ús del programari ChemBio3D, i fer prediccions senzilles de diferents propietats (radis atòmics, direccions de contacte, densitats, energies reticulars, etc.)

Pràctica 7: Determinació de masses atòmiques i moleculars.

- Aprendre a manipular i fer càlculs amb gasos.
- Aplicar la llei de gasos ideals i la llei de Dalton de les pressions parcials.
- Determinar la massa equivalent i la massa atòmica d'un metall a partir d'una reacció química.

- Determinar la massa molecular d'un gas a partir de la seva densitat.
- Calcular la massa molecular mitjana de l'aire.
- Treballar amb la pressió de vapor de l'aigua a l'aire i amb el concepte de la humitat relativa.

Pràctica 8: Us del calorímetre per estudiar processos de canvi de fase i de dissolució.

- Determinar la capacitat calorífica del calorímetre utilitzant el mètode de les barreges, ja que és una dada que necessitem conèixer per completar aquesta pràctica i les següents.
- Determinar la calor latent de fusió del gel.
- Determinar l'entalpia de dissolució de dues substàncies líquides.

Pràctica 9: Determinació de calors de reacció.

- Determinar les calors de reacció (entalpies de reacció) de diferents processos químics (àcid/base i redox) en dissolució mitjançant la utilització d'un calorímetre a pressió constant.
- Analitzar els factors dels que depenen els canvis d'entalpia mesurats.
- Estudiar l'estequiometria de les reaccions de neutralització àcidbase.
- Comparar les entalpies de reacció de les reaccions àcidbase i redox.

Pràctica 10: Determinació de la variació d'entalpia i d'entropia de la dissolució de la urea.

- L'objectiu de l'experiment és determinar H° i K_{eq} per a la dissolució de la urea, NH_2CONH_2 , en aigua. A partir d'aquesta informació, es calcularà G° i S° .

Pràctica 11: Mesura del pH. Força relativa d'àcids i bases.

- Aprendre a utilitzar un pHmetre.
- Mesurar el pH d'un conjunt de solucions aquoses d'àcids i de bases i ordenarlos segons la seva força relativa.
- Observar la influència de la dilució en l'equilibri.
- Observar el diferent comportament entre solucions amortidores de pH i sistemes no amortits a partir de l'observació dels canvis de pH quan s'hi afegeix un àcid o una base forts.

Pràctica 12: Volumetries àcid-base. Indicadors.

- Assolir la metodologia bàsica per dur a terme volumetries, que en aquest cas són basades en equilibris àcidbase.
- Estudi experimental de la importància de triar correctament l'indicador.
- Saber construir una corba de valoració experimental, comprovar que té la forma prevista teòricament, i veure que els indicadors viren a la zona prevista.

Pràctica 13: Determinació de la constant d'acidesa de l'àcid acètic.

- En termes generals, l'objectiu d'aquest experiment és l'estudi quantitatiu de l'equilibri químic analitzant un equilibri àcidbase en medi aquós.
- Determinar la constant d'acidesa de l'àcidacètic i observar que les constants d'equilibri corresponen a una realitat "palpable" experimentalment.

- Aprendre a obtenir dades quantitatives a partir d'una sèrie de resultats experimentals que segueixen una llei física.

Pràctica 14: Determinació de productes de solubilitat de sals insolubles de plata.

- Aprendre a preparar una solució saturada d'una sal poc soluble de manera controlada.
- Determinar la solubilitat d'una sal poc soluble.
- Aprendre el concepte pràctic del bescanvi iònic.
- Determinar el producte de solubilitat d'una sal poc soluble.
- Observar i reflexionar sobre l'efecte de l'ió comú.

Pràctica 15: Extracció líquid-líquid i separació de mescles.

- Aprendre la tècnica d'extracció simple.
- Separació de tres substàncies conegudes dissoltes en un dissolvent orgànic a partir d'un procés d'extracció simple aprofitant el diferent caràcter àcidbase de les substàncies que s'han de separar.
- Comprovació de l'eficiència de la separació mitjançant la tècnica de cromatografia de capa fina.
- Separació d'una mescla binària desconeguda. S'assignarà una mostra problema i es donarà informació a l'alumne sobre el tipus de compost que conté. Reconèixer les substàncies separades.

Pràctica 16: Cel·les Electroquímiques.

- Construcció d'una Taula de Potencials Estàndards
- Construcció de Cel·les Electroquímiques Galvàniques senzilles per tal d'obtenir electricitat a partir de reaccions químiques.

Pràctica 17: Síntesi de l'àcid acetilsalicílic.

- Sintetitzar un certa quantitat d'àcid acetilsalicílic (AAS) a partir de l'àcid salicílic (AS) comercial.
- Purificar el producte de la reacció (AAS).
- Determinar el rendiment de la reacció.
- Discutir, de manera qualitativa, la puresa del producte obtingut.

Pràctica 18: Cinètica: Hidròlisi en medi bàsic de l'àcid acetilsalicílic.

- Determinar la constant de velocitat k per a la reacció d'hidròlisi de l'àcid acetilsalicílic en un comprimit comercial a temperatura ambient.
- Determinar la constant de velocitat k per a la reacció d'hidròlisi de l'àcid acetilsalicílic sintetitzat a temperatura ambient.
- Determinar la constant de velocitat k per a la reacció d'hidròlisi de l'àcid acetilsalicílic en comprimit comercial a 40 °C.
- Determinar l'energia d'activació experimental E_a de la mateixa reacció, mitjançant els valors de k obtinguts a diferents temperatures.

Per la part de Documentació els objectius generals són: / For the Documentació part, general objectives are:

. Conèixer la importància de la Documentació com a eina de treball pels professionals i/o investigadors sobretot del camp de la Química. / To know the importance of Information science as a tool to work in any profession in Chemistry field principally.

. Aprendre diferents tipologies de fonts d'informació de Químiques, i quan i com s'han d'utilitzar. / To learn the different typologies of information resources on chemistry, and when had to be used.

. Aprendre les tècniques bàsiques de la recuperació de la informació especialitzada i de la seva aplicació en Química. / To learn basic techniques to information retrieval and information management in chemistry.

Com a segon objectiu: / A secondary objective:

El principal objectiu secundari és la realització d'un projecte sobre una Molècula. Aquest projecte consistirà en usar totes les metodologies, eines i instruments presentats al llarg del curs per buscar i recuperar informació específica sobre la molècula. / The main secondary objective is to realize a Molecule's research project: This project consists in to use all the methodologies and tools presented during the curs to retrieve information for a specific molecule.

Competències

- Adaptar-se a noves situacions.
- Aprendre de manera autònoma.
- Avaluar els riscos sanitaris i l'impacte ambiental i socioeconòmic associat a les substàncies químiques i a la indústria química.
- Comunicar-se oralment i per escrit en la llengua pròpia.
- Demostrar iniciativa i esperit emprenedor.
- Demostrar motivació per la qualitat.
- Demostrar que es comprenen els conceptes, els principis, les teories i els fets fonamentals de les diferents àrees de la química.
- Emprar correctament la llengua anglesa en l'àmbit de la química.
- Gestionar l'organització i la planificació de tasques.
- Gestionar, analitzar i sintetitzar informació.
- Interpretar les dades obtingudes mitjançant mesures experimentals, incloent-hi l'ús d'eines informàtiques; identificar-ne el significat i relacionar les dades amb les teories químiques, físiques o biològiques apropiades.
- Manejar instruments i material estàndard en laboratoris químics d'anàlisi i síntesi.
- Manipular amb seguretat els productes químics.
- Mantenir un compromís ètic.
- Mostrar sensibilitat en qüestions mediambientals.
- Obtenir informació, incloent-hi la utilització de mitjans telemàtics.
- Proposar idees i solucions creatives.
- Raonar de forma crítica.
- Reconèixer i analitzar problemes químics i plantejar respostes o treballs adequats per a resoldre'ls.
- Resoldre problemes i prendre decisions.
- Tenir destresa per al càlcul numèric.
- Utilitzar la informàtica per al tractament i presentació d'informació.

Resultats d'aprenentatge

1. Adaptar-se a noves situacions.
2. Aprendre de manera autònoma.
3. Comunicar-se oralment i per escrit en la llengua pròpia.
4. Demostrar iniciativa i esperit emprenedor.
5. Demostrar motivació per la qualitat.
6. Dur a terme procediments de síntesi, separació i anàlisis bàsiques en un laboratori de química.
7. Gestionar l'organització i la planificació de tasques.

8. Gestionar, analitzar i sintetitzar informació.
9. Identificar les mesures de seguretat en un laboratori químic.
10. Identificar les principals fonts bibliogràfiques en l'àmbit de la química.
11. Manipular correctament el material de vidre en un laboratori de química.
12. Mantenir un compromís ètic.
13. Mostrar sensibilitat en qüestions mediambientals.
14. Obtenir informació, incloent-hi la utilització de mitjans telemàtics.
15. Proposar idees i solucions creatives.
16. Racionalitzar els resultats obtinguts al laboratori en processos de síntesi, separació i anàlisi de compostos químics a partir del coneixement de la seva estructura i les seves propietats.
17. Raonar de forma crítica.
18. Realitzar consultes bibliogràfiques en l'àmbit de la química en fonts d'informació en llengua anglesa i reconèixer els termes bàsics en química en aquest idioma.
19. Realitzar recerques bibliogràfiques de documentació química.
20. Resoldre problemes i prendre decisions.
21. Tenir destresa per al càlcul numèric.
22. Utilitzar correctament els protocols de manipulació de reactius i residus químics tenint-ne en compte les propietats físiques i químiques.
23. Utilitzar la informàtica per al tractament i presentació d'informació.
24. Utilitzar programes informàtics per al tractament estadístic de dades.

Continguts

L'assignatura consta de dues parts diferenciades: experimentació al laboratori (6 ECTS) i Documentació (aprenentatge de les eines i metodologies d'accés a la informació química) (3 ECTS).

Cadascuna de les parts té un contingut específic. L'experimentació al laboratori està estructurada en 5 blocs i cadascun consta de 5 pràctiques. El contingut de la Documentació consta de 6 temes.

PRÀCTIQUES D'EXPERIMENTACIÓ EN QUÍMICA

BLOC 1: Introducció a l'experimentació en Química.

Pràctica 1: Tractament de dades: Mesura de volums. Errors experimentals. Ús de l'Excel per a fer gràfiques i càlculs

Pràctica 2: Densitats. Determinació de la concentració d'una dissolució a partir de la seva densitat. Ús de l'Excel per fer gràfiques i regressions lineals

Pràctica 3: Reaccions de precipitació. Concepte de reactiu limitant. Rendiment de reaccions de precipitació de CaCO_3

Pràctica 5: Reaccions redox. Estequiometria de les reaccions en solució aquosa. Reaccions redox en tub d'assaig. Determinació de la concentració d'una solució problema mitjançant una reacció redox.

BLOC 2: Estructura atòmica i enllaç.

Pràctica 6: Orbitals atòmics i moleculars. Estudi d'orbitals atòmics senzills. Ús del programa ChemBio3D per estudiar els orbitals moleculars de molècules diatòmiques homo i heteronuclears. Càlcul dels orbitals moleculars i ús del concepte HOMO LUMO.

Pràctica 7: Geometria molecular. Estructures cristallines. Ús del programa ChemBio3D per estudiar geometries de molècules segons la teoria de repulsió dels orbitals de la capa de valència. Visualització, amb models i a l'ordinador, de diferents estructures iòniques i de sòlids covalents.

BLOC 3: Gasos i Termodinàmica.

Pràctica 8: Determinació de masses atòmiques i moleculars. Determinació de la massa molecular d'un gas. Determinació de la massa equivalent i la massa atòmica d'un metall.

Pràctica 9: Us del calorímetre per estudiar processos de canvi de fase. Calibratge d'un termòmetre digital. Càlcul de la capacitat calorífica del calorímetre. Determinació del calent de fusió del gel.

Pràctica 10: Determinació de calors de reacció. Determinació d'entalpies de neutralització en reaccions àcid-base i d'entalpies de dissolució.

Pràctica 11: Determinació de la variació d'entalpia i d'entropia de la dissolució de la urea. Càlcul de l'energia lliure de Gibbs i de la constant de la reacció de la dissolució d'urea en aigua.

BLOC 4: Equilibri químic.

Pràctica 12: Mesura del pH. Força relativa d'àcids i bases. Calibratge i ús d'un pH-metre. Estudi del concepte de tampó. Càlcul del grau de dissociació d'un àcid feble.

Pràctica 13: Volumetries àcid-base. Indicadors. Realització de volumetries àcid-base amb indicadors i amb seguiment potenciomètric. Com triar l'indicador adient per a una valoració.

Pràctica 14: Determinació de la constant d'acidesa de l'àcid acètic. Aplicació del mètode de les dissolucions. Ús d'un mètode gràfic i l'ajust per mínims quadrats per trobar una constant de dissociació.

Pràctica 15: Determinació de productes de solubilitat de sals insolubles de plata. Determinació de la solubilitat de $PbCl_2$ en aigua. Preparació i ús de reïnes de bescanvi iònic. Determinació de la K_{ps} del $PbCl_2$. Efecte de l'ió comú.

BLOC 5: Electroquímica, Cinètica i grups funcionals orgànics.

Pràctica 16: Extracció líquid-líquid i separació de mesclures. Separacions de mesclures conegudes i desconegudes de dos i de tres components. Identificació per cromatografia de capa prima.

Pràctica 17: Cel·les Electroquímiques. Construcció de cel·les galvàniques. Càlcul de taules de potencials.

Pràctica 18: Síntesi de l'àcid acetilsalicílic. Obtenció i purificació del producte a partir d'àcid salicílic comercial.

Pràctica 19: Cinètica: Hidròlisi en medi bàsic de l'àcid acetilsalicílic. Estudi de la cinètica d'hidròlisi seguint espectrofotomètricament la concentració d'àcid acetilsalicílic. Estudi de la influència de la temperatura i càlcul de l'energia d'activació.

LA TEORIA I PRÀCTIQUES DE LA PART DE DOCUMENTACIÓ CONTINDRAN EN GENERAL ELS TEMES SEGÜENTS. / THEORY AND PRACTICES FOR THE DOCUMENTACIÓ PART FULLFILL THE FOLLOWING SUBJECTS.

1. Introducció a la Documentació científica. Importància de la Documentació. Incidència de la informació en el desenvolupament científic i tècnic. Les necessitats informatives i els problemes de la recuperació de la informació. Concepte i objectius de la Documentació.

1. Introduction to Science information. Importance of science information. Areas where it can be applied to help on science and technology development. Information needs and problems related to information retrieval. Definition and objectives of science information.

2. Tractament i gestió de la informació: els sistema o cadena documental. Noció de sistema, Conceptes generals de la cadena documental i elements que la formen. Entrada, processament i sortida de la informació. Serveis d'Informació i Documentació.

2. Information treatment and management: The system or information chain. System notion. General concepts of information chain and elements that belongs to it. Entrance, process and exit of information.

Information and Information Science services.

3. Fonts d'informació i suports documentals. El concepte de font d'informació. Fonts primàries i secundàries. Obres de referència. Literatura gris. Ponències, Patents, Articles, Tesis, Normes. Obres de referència especialitzades per a químics. Fonts d'informació secundàries especialitzades. Tipologies de suports documentals.

3. Information sources and documental supports. The concept of information source. Primary and secondary information sources. Reference sources. Grey literatures. Papers. Patents. Articles. Doctoral thesis. Standards. Specialized reference sources for chemists. Specialized secondary information sources. Documental supports typology.

4. Informació electrònica. Bases de dades: concepte, estructura i components. Tipologies de les bases de dades. Recursos electrònics especialitats en química. Tipus d'accés.

4. Electronic information. The databases: concept, Electronic structure and components. Typologies of databases. Electronic resources to chemists specialized. Ways of access.

5. Recuperació de la informació. Llenguatges d'indexació. Llenguatges d'interrogació. Disseny d'estratègies de cerca. Elements d'acotació.

5. Information retrieval. Indexing languages. Interrogative and retrieval Languages. Search strategies design. Elements to limit the number of results.

6: Internet com a font d'informació. Breu introducció a Internet. Motors de cerca i directoris. Utilitats i serveis. Web 2.0 i 3.0. La www com a font d'informació pels químics. Criteris d'valuació de webs i portals. Perspectives de futur.

6. Internet as information source. Short introduction to Internet. Search engines and directories. Utilities and services. Web 2.0 i 3.0. The www as a information source for chemists. Evaluation criteria of webs and portals. Future perspectives.

Metodologia

L'assignatura "Documentació i Experimentació en Química" (9 ECTS), junt amb l'assignatura "Fonaments de Química" (15 ECTS), forma part de la matèria "Química" del grau de Química, que té un total de 24 ECTS de caràcter bàsic i està situada al primer curs del Pla d'Estudis. Les dues assignatures estan coordinades, de forma que l'avaluació de la part de l'assignatura "Fonaments de Química" que està relacionada amb les pràctiques, es fa després d'acabar el bloc de pràctiques corresponent. Així les pràctiques es beneficien de tenir les explicacions teòriques properes al temps i serveixin per acabar d'entendre la teoria.

Les pràctiques de laboratori consten de 5 blocs, després de que a l'assignatura de teoria es tracti el tema específic. Cada bloc de laboratori té 5 pràctiques de 4h cada una, que es realitzen als laboratoris del Departament de Química o a la Sala d'Ordinadors de la Facultat.

Abans de començar les pràctiques hi haurà una sessió conjunta en un aula a on es recordaran les normes que apareixen a aquesta Guia Docent i les informacions d'última hora.

Els dies que es fan les pràctiques de laboratori d'aquesta assignatura no hi ha classes de teoria.

Les pràctiques de laboratori es fan en parelles i a cada bloc de pràctiques canvien els companys de les parelles. Per a cada bloc de pràctiques, els guions i la llista de parelles es publiquen al campus virtual. Els informes i avaluacions són individuals.

L'assistència és obligatòria. Una falta no justificada implica un zero de la pràctica. Els alumnes han d'entrar al laboratori amb el guió de la pràctica llegit i amb els càlculs que demana la preparació de dissolucions plantejats des de casa. És possible que tinguin que realitzar un curt test (menys de 10 minuts) per comprovar que realment han llegit el guió.

Abans de cada pràctica, el professor explicarà els punts més importants i els detalls a tenir en compte.

Un cop acabada la pràctica i endreçat el material, els alumnes omplen, de manera individual, l'informe de la pràctica i contesten les qüestions que es plantegen per a la seva avaluació. Pot ser que, en alguns casos concrets, els alumnes s'enduguin l'informe a casa per poder fer els càlculs amb més tranquil·litat i l'entreguin l'endemà.

Per la Part de Documentació, dins de l'assignatura "Experimentació i Documentació en Química" hi haurà 3 sessions teòriques (2 hores per cada una). En les sessions teòriques i pràctiques s'introduiran conceptes, metodologies i eines, generals i en l'àmbit de la química. / **For the Documentation part**, inside of the subject "Experimentació i Documentació en Química" will have 3 theoretical sessions (2 hours each one). In theory and practical sessions will be introduced general concepts, methodologies and tools, generals and chemistry field.

La llengua vehicular serà el català. Les pràctiques, exercicis, treballs, consultes, ..., es podran fer en català i en castellà. Els materials s'entregan en la llengua original o en català o en anglès. / The used language will be catalan. Practices, exercises, works, questions, ..., will be done in catalan or spanish. The materials, communications, hand over in the original language or in catalan or spanish.

La teoria es farà a les aules de teoria amb tots els alumnes (2 grups un de matí i un de tarda) i les pràctiques a les aules d'informàtica (8 grups, 4 de matí i 4 de tarda). / Theory sessions will be held at the theory classrooms with all the students, and practical sessions will held at the computer classrooms (8 groups, 4 in the morning, and 4 in the afternoon).

L'assistència és obligatòria, tant per les sessions teòriques com per les pràctiques / Assistance is compulsory, as the theoretical sessions as and practical sessions.

Les pràctiques es realitzaran per parelles. Els alumnes hauran de buscar les seves parelles. És necessari que les parelles siguin sempre les mateixes per a tots els exercicis. L'avaluació serà individual. / All practices must be done in couples. Students will have to find their partners. It is compulsory to have the same partner for all the exercises. Evaluation will be done individually.

Abans i després de cada sessió teòrica el/la professor/ra donarà (Campus Virtual) els materials necessaris per la classe / Before and after each theoretical session the professor will give (Virtual Campus) a necessary materials for the class.

Abans de cada pràctica el/la professor/a donarà les explicacions i recomanacions teòriques necessàries. / Before each practice the professor will give a necessary theory explanation and recommendations.

Per el desenvolupament d'aquesta part de l'assignatura s'utilitzarà el Campus Virtual. / To the development the part of this subject will be use the Virtual Campus.

Activitats formatives

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Tipus: Dirigides			
Pràctiques a les aules d'informàtica (Part Documentació) / Practices in the computer classrooms	6,1	0,24	1, 10, 14, 15, 17, 18, 19
Realització de les pràctiques al laboratori	88,9	3,56	1, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 12, 13, 15, 16, 17, 20, 21, 22
Tipus: Supervisades			
Portfoli alumne (Part Documentació) / Student portfolio	6,1	0,24	3, 7, 8, 10, 12, 14, 15, 17, 18, 20, 23
Projecte de documentar una molècula (Part Documentació) / Molecule's research project	9,25	0,37	2, 5, 7, 8, 10, 14, 15, 17, 18, 19, 23

Qüestionaris Teoria (Part Documentació) / Theory questionaries	1,44	0,06	3, 8, 10, 17, 18, 19, 20
Tipus: Autònomes			
Estudi autònom (Part Documentació) / Authonomous study	14,22	0,57	2, 3, 7, 8, 10, 14, 15, 18, 19, 23
Lectura i estudi dels guions i preparació de les pràctiques al laboratori	17,5	0,7	1, 2, 3, 4, 5, 7, 8, 12, 13, 14, 15, 17, 20, 21
Realització d'informes de les pràctiques fora del laboratori	15	0,6	2, 3, 7, 15, 17, 21, 23, 24

Avaluació

A l'assignatura, totes les activitats que es realitzen compten per a l'avaluació.

Les dues parts de l'assignatura tenen una avaluació individual i independent (les activitats d'avaluació de la part de laboratori les podeu trobar escrites en català i les de la part de documentació en anglès). La nota final és la mitjana ponderada pel nombre de crèdits de cada part.

És necessari aprovar les dues parts per aprovar l'assignatura.

Respecte a la part d'Experimentació al laboratori: el pes més important són els informes que s'entreguen al final de cada pràctica. A l'informe s'han de posar els resultats experimentals obtinguts a la pràctica i contestar les preguntes que es demanen, deixant constància dels gràfics i càlculs necessaris. Es valora la metodologia seguida per a les respostes, la forma amb que es comuniquen les respostes i la bondat de les dades experimentals trobades. També es tindran en compte les proves prèvies (abans de començar cada pràctica) per demostrar que s'ha llegit els informes i l'actitud de treball al laboratori.

L'assistència és obligatòria. Una falta no justificada implica un zero de la pràctica.

La nota final serà el promig de les notes de totes les pràctiques.

Respecte a la part de Documentació: l'avaluació es farà tenint en compte els percentatges indicats a la taula, (veure on posa Part de Documentació). S'aplicarà la mitjana de totes les parts, sempre i quan la nota de cada part no sigui inferior a 4,5 punts. / **Respect to the Documentation part:** Evaluation will be made according to the percentage in the table, . Will be applied the average in the all parts , if the mark isn't low to 4,5 points.

L'assistència és obligatòria. La no assistència es penalitzarà amb un quart de punt (0,25.) / Assistance is compulsory. Not assistance will be penalization with a quarter point (0,25).

Activitats d'avaluació

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Estudi autònom (Part Documentació) / Authonomous study	33%	15	0,6	1, 2, 3, 7, 8, 10, 12, 14, 15, 17, 18, 19, 20, 23
Informe de la pràctica	65%	18,75	0,75	1, 3, 4, 5, 8, 12, 15, 16, 17, 20, 21, 24
Portfoli alumne (Part Documentació) / Student portfoli	20%	6,1	0,24	1, 2, 3, 5, 7, 8, 10, 12, 14, 15, 17, 18, 19, 20, 23
Preparació de les pràctiques	5%	3,75	0,15	2, 4, 5, 7, 8, 12, 13, 14,

				17, 20
Projecte de documentar una molécula (Part de Documentació) / Molecule's research project	25%	9,25	0,37	2, 3, 5, 7, 8, 10, 14, 15, 17, 18, 19, 23
Pràctiques a les aules d'informàtica Part Documentació) / Practices in the computer classroom	20%	6,1	0,24	1, 2, 3, 5, 7, 10, 14, 15, 17, 18, 19, 20, 22
Qüestionaris Teoria (Part Documentació / Theory Questionaries	2%	1,44	0,06	2, 3, 5, 8, 10, 14, 17, 18, 20
Resultats de la pràctica	20%	6,1	0,24	3, 6, 11, 21, 23, 24

Bibliografia

Textos principals de referència:

- El document principal per a la part de laboratori és el "Llibre de pràctiques de l'assignatura Experimentació en Química". Departament de Química. Conté la informació necessària per treballar al laboratori i els guions de totes les pràctiques. Cada pràctica indica quins conceptes del llibre s'han de repassar. Es troba al Campus Virtual de la UAB.

- El llibre de text de l'assignatura "Fonaments de Química" proporcionarà la informació teòrica necessària per a cada pràctica. Al guió de cada una hi ha la indicació de les pàgines del llibre que s'han de llegir. R.H. Petrucci, W.S. Harwood i F.S. Herring. "Química General" 8ª ed.. Pearson Education S.A., Madrid (2003).

Textos complementaris:

- Un llibre de pràctiques de laboratori que es pot buscar a la biblioteca per si no queda clar algun dels experiments. Manuel Fernández González, Operaciones de Laboratorio de Química, Ed. Anaya (2004).

- Un llibre de text que es troba a la biblioteca i que conté explicacions sobre l'ús d'Excel, xifres significatives i informació complementària sobre el bloc 4 (Equilibri Químic). Daniel C. Harris. "Anàlisi química quantitativa". Ed. Reverté S.A. Barcelona (2006)

- Un llibre que es troba a la biblioteca i que aporta més informació sobre el bloc 3 (Termodinàmica) i el bloc 5 (Electroquímica i cinètica). R. Chang. *Química General*, 9ª edició, Ed. McGrawHill, 2007.

Altres recursos:

Normes de seguretat als laboratoris docents del Departament de Química:

http://dept-quimica.uab.cat/catala/cat_grau/grau_normes.asp

Orbital viewer: <http://www.orbitals.com/orb/ov.htm>

Anàlisi de propietats: EI, AE, densitat, conductivitat elèctrica: <http://www.webelements.com/> i <http://www.dayah.com/periodic/>

Orbitals híbrids: http://www.mpcfaculty.net/ron_rinehart/orbitals.htm

ChemOffice: <http://www.mhhe.com/physsci/chemistry/essentialchemistry/flash/hybrv18.swf>

Bibliografia bàsica recomanada per la part de Documentació: / Basic recommended bibliography for Documentation part:

Bachrach, Steven M (ed.). *The Internet. A Guide for Chemists*. Washington, DC.: American Chemical Society, 1996. 344 p. ISBN 0-8412-3224-5.

Bosch José, Elisabeth (ed.); et al. *Documentació Química*. 1ª reimpr. actualitzada. Barcelona: Edicions de la

Universitat de Barcelona, 1999. 143 p. (Textos docents ; 114). ISBN 84-8338-153-2.

López Borrull, Alexandre. *Síntesi i caracterització estructural de complexos d'Ag(I) amb lligands de tipus tiourea o tioarida. Estudi de fonts d'informació electrònica especialitzades en química*. Tesi doctoral, 2003. <http://www.tdx.cesca.es/TDX-0123104-161254/>.

López Borrull, Alexandre. "Cercant les molècules en el món digital: una visió actual de les fonts d'informació químiques". Dins: Fuentes i Pujol, Maria Eulàlia. *Bibliodoc 2000*. Barcelona: Col·legi Oficial de Bibliotecaris-Documentalistes de Catalunya, 2000. p. 123-138. ISBN 84-86972-123-2. <http://www.raco.cat/index.php/Bibliodoc/article/view/16626/16467>

Maizell, Robert E. *How to find chemical information a guide for practicing chemists, educators, and students*. 3rd ed. New York [etc.]: Wiley, cop.1998. 515 p. ISBN 0-471-12579-2

Ribera i Fuentes, Marc. *Desenvolupament d'una eina per a l'avaluació del comportament ambiental de contaminants químics. Visió química i visió documental*. Tesi doctoral, 2010.

Schulz, Hedda. *From CA to CAS online databases in chemistry*. 2nd, completely rev. and enlarged ed. Berlin [etc.]: Springer-Verlag, cop. 1994. 311 p. ISBN 3-540-57483-2

Webs interessants / Webs of interest:

Williams, Robert V.; Bowden, Mary Ellen (comp.). *Chronology of chemical information science* [en línia]. [s.l.]: Chemical Heritage Foundation, 11 agost 1999. <http://www.libsci.sc.edu/bob/chemnet/CHCHRON.HTM> [Consulta: agost 2007]

Alemaný i Cahner, Pere. *Química a Internet. Index* [en línia] http://www.qf.ub.es/c2/grup-ee/links.dir/qui_int.dir/apunts.dir/index.html [s.n.], juliol 2000. [Consulta: setembre 2007]

Murray-Rust, Peter; Rzepa, Henry S; Whitaker, Benjamin J. *The World-Wide Web as a Chemical Information Tool* [en línia]. <http://www.ch.ic.ac.uk/rzepa/RSC/chemsocrev/> [Consulta: setembre 2007]