

**Experimentació i Recursos Informàtics**

Codi: 105034

Crèdits: 8

| Titulació       | Tipus | Curs | Semestre |
|-----------------|-------|------|----------|
| 2502444 Química | FB    | 1    | A        |

La metodologia docent i l'avaluació proposades a la guia poden experimentar alguna modificació en funció de les restriccions a la presencialitat que imposin les autoritats sanitàries.

**Professor/a de contacte**

Nom: Luis Rodríguez Santiago

Correu electrònic: Luis.Rodriguez.Santiago@uab.cat

**Utilització d'idiomes a l'assignatura**

Llengua vehicular majoritària: català (cat)

Grup íntegre en anglès: No

Grup íntegre en català: Sí

Grup íntegre en espanyol: No

**Equip docent**

Maria Mercè Capdevila Vidal

Jordi Coello Bonilla

Jordi Gené Torradella

Manel del Valle Zafra

Ramón Yáñez López

Jean-Didier Pierre Marechal

Jordi Hernando Campos

Xavier Fernández-Luengo Flores

Laura Tiessler Sala

Lorena Roldán Martín

Iker Zapiain Gysling

Montserrat López Mesas

Albert Rimola Gibert

Eva Monteagudo Soldevilla

José Emilio Sánchez Aparicio

**Prerequisits**

En ser una assignatura de primer curs, no hi ha prerequisits acadèmics per matricular-se. No obstant, és una assignatura particular amb una gran part de pràctiques en laboratori. Per tant té unes característiques i normatives especials.

La seguretat és un dels aspectes més rellevants. El comportament de l'alumnat 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 fer el test de seguretat que apareix al campus virtual i,

un cop superat, imprimir i signar el full que ho manifesta. Aquest full s'ha d'entregar el primer dia de laboratori als professors. Sense aquest document no es poden realitzar les pràctiques.

Les normes les podeu trobar i baixar en format pdf del campus virtual o de la següent adreça:  
[http://www.uab.cat/doc/DOC\\_Normativa\\_Segur\\_Lab\\_Docent](http://www.uab.cat/doc/DOC_Normativa_Segur_Lab_Docent).

Durant les pràctiques, els alumnes han de dur sempre 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. És recomanable que vagin al laboratori amb un ordinador portàtil per fer càlculs amb Excel.

## Objectius

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

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 líquidlíquid de substàncies d'un solvent a un altre de diferent polaritat.
- Determinar la concentració d'una solució problema usant una reacció redox.

#### Pràctica 5: 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 6: 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 7: Determinació de calors de reacció i de dissolució

- 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 8: Determinació de la variació d'entalpia i d'entropia de la dissolució de la urea

- L'objectiu de l'experiment és determinar  $\Delta H^\circ$  i  $K$  per a la dissolució de la urea,  $\text{NH}_2\text{CONH}_2$ , en aigua. A partir d'aquesta informació, es calcularà  $\Delta G^\circ$  i  $\Delta S^\circ$ .

#### Pràctica 9: 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 10: Cinètica de la reacció del violeta de metil en medi bàsic

- Determinar la pseudo-constant de velocitat  $k'$  per a la reacció del violeta de metil en medi bàsic en excés d'ió hidroxil i a temperatura ambient.
- Determinar l'ordre de la reacció respecte a l'hidroxil i el violeta de metil.
- Determinar la constant de velocitat  $k$  per a la reacció del violeta de metil en medi bàsic.

#### 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 ordenar-los 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 aquestes són basades en equilibris àcid-base.
- 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 àcid-base en medi aquós.
- Determinar la constant d'acidesa de l'àcid acètic 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: Solubilitat i Kps de sals poc solubles en aigua. Efecte de l'ió comú

- 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: 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 16: 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.

Per la part de Recursos Informàtics l'objectiu general és donar una base sòlida als alumnes en competències transversals i específiques de les eines informàtiques. Es pretén permetre que els estudiants adquireixin unes fortes nocions tant estructurals com analítiques en la gestió de base de dades i algoritmia.

## Competències

- "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."
- Adaptar-se a noves situacions.
- Aplicar els coneixements químics a la resolució de problemes de naturalesa quantitativa o qualitativa en àmbits familiars i professionals.
- 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.
- 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. Anomenar i formular els compostos químics orgànics i inorgànics.
3. Aprendre de manera autònoma.
4. Comunicar-se oralment i per escrit en la llengua pròpia.
5. Demostrar iniciativa i esperit emprenedor.
6. Demostrar motivació per la qualitat.
7. Determinar concentracions d'àcids i bases a partir de valoracions àcid-base.
8. Dur a terme procediments de síntesi, separació i anàlisis bàsiques en un laboratori de química.
9. Gestionar l'organització i la planificació de tasques.
10. Gestionar, analitzar i sintetitzar informació.
11. Identificar les mesures de seguretat en un laboratori químic.
12. Identificar les principals fonts bibliogràfiques en l'àmbit de la química.
13. Manipular correctament el material de vidre en un laboratori de química.
14. Mantenir un compromís ètic.
15. Mostrar sensibilitat en qüestions mediambientals.
16. Obtenir informació, incloent-hi la utilització de mitjans telemàtics.
17. Proposar idees i solucions creatives.
18. 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.
19. Raonar de forma crítica.
20. 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.
21. Realitzar recerques bibliogràfiques de documentació química.
22. Resoldre problemes i prendre decisions.

23. Tenir destresa per al càlcul numèric.
24. Treballar correctament amb equacions químiques i amb les principals magnituds de la matèria.
25. Utilitzar correctament els protocols de manipulació de reactius i residus químics tenint-ne en compte les propietats físiques i químiques.
26. Utilitzar la informàtica per al tractament i presentació d'informació.
27. Utilitzar programes informàtics per al tractament estadístic de dades.

## Continguts

L'assignatura consta de dues parts diferenciades: Experimentació al laboratori (5 ECTS) i Recursos Informàtics (3 ECTS).

Cadascuna de les parts té un contingut específic. L'experimentació al laboratori està estructurada en 3 blocs, i cadascun consta de diverses pràctiques al laboratori. La part de Recursos Informàtics consta de 4 blocs i un total de 20 sessions de pràctiques d'ordinador.

### 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  $\text{CaCO}_3$ .

Pràctica 4: 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.

Pràctica 5: 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.

#### BLOC 2: Termodinàmica i cinètica

Pràctica 6: 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 7: Determinació de calors de reacció. Determinació d'entalpies de neutralització en reaccions àcid-base i d'entalpies de dissolució.

Pràctica 8: 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.

Pràctica 9: 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 10: Cinètica: Cinètica de la reacció del violeta de metil en medi bàsic. Estudi de la cinètica de la reacció seguint espectrofotomètricament la concentració del violeta de metil. Càlcul de l'ordre de la reacció i de la constant de velocitat.

#### BLOC 3: Equilibri químic, electroquímica i grups funcionals orgànics

Pràctica 11: 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 12: 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 13: 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 14: Solubilitat i  $K_{ps}$  de sals poc solubles en aigua. Efecte de l'ió comú. Determinació de la solubilitat de  $\text{PbCl}_2$  en aigua. Preparació i ús de reines de bescanvi iònic. Determinació de la  $K_{ps}$  del  $\text{PbCl}_2$ . Efecte de l'ió comú.

Pràctica 15: Cel·les Electroquímiques. Construcció de cel·les galvàniques. Càlcul de taules de potencials.  
Pràctica 16: Síntesi de l'àcid acetilsalílic. Obtenció i purificació del producte a partir d'àcid salicílic comercial.

El contingut de la part de Recursos Informàtics inclou les següents pràctiques:

#### Bloc A. Excel Bàsic

- Pràctica 1. Introducció a l'Excel, organització de dades, obrir-importar-exportar dades, presentació general del software, càlculs elementals, format i format condicional, ajustar decimals, ordenar, aplicar filtres ordenació.
- Pràctica 2. Fórmules estadístiques (variabilitat en funció idioma software), fórmules lògiques.
- Pràctica 3. Gràfics, histogrames, barres, x-y, ajustos línia/corba de tendència.
- Pràctica 4. Plantilles i formularis.

#### Bloc B. Estructures i bases de dades

- Pràctica 5. Fitxes de seguretat.
- Pràctica 6. Introducció dibuix molecular 2D.
- Pràctica 7. Geometria molecular 3D, exploració de conformacions, perspectives, etc..
- Pràctica 8. Orbitals atòmics i moleculars.
- Pràctica 9. Anàlisi d'estructures de sòlids.
- Pràctica 10. Scifinder.

#### Bloc C. Excel Avançat

- Pràctica 11. Taules dinàmiques.
- Pràctica 12. Anàlisi de dades.
- Pràctica 13. Regressió múltiple. Càlculs iteratius i "Cerca d'objectius".
- Pràctica 14. Càlculs avançats emprant Solver

#### Bloc D. Programació en l'àmbit molecular

- Pràctica 15. Introducció a Linux. Introducció a Python.
- Pràctica 16. Programació en Python 1.
- Pràctica 17. Programació en Python 2.
- Pràctica 18. Integració python en àmbits químics 1- Mòduls científics i resolució de problemes químics.
- Pràctica 19. Integració python en àmbits químics 2- Mòduls científics i resolució de problemes químics.
- Pràctica 20. Integració python en àmbits químics 3 - Visualització molecular i UCSF Chimera.

## Metodologia

L'assignatura "Experimentació i Recursos Informàtics" (8 ECTS), junt amb les assignatures "Fonaments de Química I" i "Fonaments de Química II" (8+8 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 assignatures són totalment independents respecte a l'avaluació, però estan coordinades, de forma que l'avaluació de la part de les assignatures Fonaments de Química I i II 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 ajuden a acabar d'entendre la teoria.

L'assignatura "Experimentació i Recursos Informàtics" compta de dues grans parts. Una d'experimentació que es centra amb treballs de Laboratoris químics. L'altre de recursos informàtics que s'orienta a l'adquisició de coneixements i competències d'eines informàtiques fonamentals per a realitzar anàlisis de dades, portar a terme cerques de fons bibliogràfics, introduir conceptes avançats de seguretat i generació materials de suport de l'àmbit químic (dibuix molecular, models).

## Experimentació.

Les pràctiques de laboratori consten de 3 blocs, després de que a l'assignatura de teoria es tracti el tema específic. Cada bloc de laboratori té diverses pràctiques, de 4h cada una, que es realitzen als laboratoris del Departament de Química o a la Sala d'Ordinadors de la Facultat. La darrera sessió del bloc es dedica a la correcció i comentari de les pràctiques realitzades.

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, 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. Les 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.

Durant 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, un informe 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.

L'espai de l'assignatura al Campus Virtual serà el lloc a on els alumnes podran trobar tota la documentació necessària per a les pràctiques.

Abans de començar el primer bloc de pràctiques estarà publicat: les normes de seguretat al laboratori i el llibre de pràctiques, que conté una primera part explicativa de les tècniques habituals al laboratori i els guions de totes les pràctiques.

Abans de començar l'assignatura, els alumnes han de fer el test de seguretat que apareix al campus virtual i, un cop superat, imprimir i signar el full que ho manifesta. Aquest full s'ha d'entregar el primer dia al laboratori. Sense aquest document no es poden realitzar les pràctiques.

Puntualment, abans de cada bloc, es publicarà el calendari i llista de parelles específica del bloc. Posteriorment es publicaran les qualificacions del bloc.

## Recursos Informàtics.

La part de Recursos Informàtics consta de 20 sessions de pràctiques.

El procediment estàndard serà:

1. Uns dies abans de la classe, l'alumnat rep material d'introducció als coneixements teòrics i pràctics de la pràctica. (Vídeos introductoris per part del professorat, documents d'estudis, enllaços internet, etc.). Pot incloure uns exercicis bàsics a resoldre.
2. El dia programat de les classes, els/les professor/e/s recapitulen els conceptes fonamentals i desenvolupen casos pràctics.
3. Al final de la classe, els alumnes hauran de resoldre una prova on-line de manera presencial i de durada d'entre 10 a 20 minuts.

Les pràctiques són obligatòries i es podran realitzar de manera individual o grupal segons ho indiqui el professorat. Una falta no justificada implica un zero a la pràctica. L'equip professorat es reserva el dret de portar a terme avaluacions addicionals als programats de cada sessió.

Nota: es reservaran 15 minuts d'una classe, dins del calendari establert pel centre/titulació, per a la complementació per part de l'alumnat de les enquestes d'avaluació de l'actuació del professorat i d'avaluació de l'assignatura/mòdul.

## Activitats formatives

| Títol                                                                                    | Hores | ECTS | Resultats d'aprenentatge                                                      |
|------------------------------------------------------------------------------------------|-------|------|-------------------------------------------------------------------------------|
| Tipus: Dirigides                                                                         |       |      |                                                                               |
| Pràctiques aula informàtica/ tutorització online (segons situació sanitària)             | 40    | 1,6  | 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 12, 16, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27 |
| Realització de les pràctiques al laboratori (segons situació sanitària)                  | 74    | 2,96 | 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 11, 13, 16, 17, 18, 19, 22, 23, 24, 25, 27         |
| Teoria                                                                                   | 1     | 0,04 | 2, 9, 11, 24                                                                  |
| Tipus: Autònomes                                                                         |       |      |                                                                               |
| Lectura dels guions i preparació de les pràctiques de laboratori (part experimentació)   | 18    | 0,72 | 2, 3, 9, 10, 19, 23, 24                                                       |
| Resolució de problemes relacionats amb l'aprenentatge de la part de Recursos Informàtics | 28    | 1,12 | 3, 4, 5, 6, 9, 10, 16, 17, 19, 20, 22, 23, 26, 27                             |

## Avaluació

Totes les activitats que es realitzen compten per a l'avaluació.

Les dues parts de l'assignatura tenen una avaluació individual i independent. La qualificació final és la mitjana de les notes de les dues parts de l'assignatura, ponderada pel nombre de crèdits de cada part. Una qualificació de "no presentat" només serà possible per a casos on l'alumne/a no hagi lliurat les avaluacions de més de 4 pràctiques (aproximadament 20%). Es necesario aprobar las dos partes para aprobar la asignatura. El aprobado se obtiene con un 5/10. Cal aprovar les dues parts per aprovar l'assignatura. L'aprobat s'obté amb un 5/10.

Respecte a la part d'Experimentació al laboratori: Se segueix un sistema d'avaluació continuada, sense possibilitat de reevaluació amb un treball o examen especial. La nota mínima per superar-la és de 5 punts (sobre 10). En aquesta nota el pes més important són els informes que s'entreguen al final de cada pràctica (pes 80%). 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 (pes 20%). La no assistència a la sessió de correcció i comentari de les pràctiques del bloc té una penalització de 1 punt (sobre 10) a la nota del bloc. La nota final d'aquesta part ser la mitjana de les notes de tots els blocs.

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

Advertiment sobre seguretat en el laboratori: L'estudiant que es vegi involucrat en un incident que pugui tenir conseqüències greus de seguretat podrà ser expulsat del laboratori i suspendre l'assignatura.

Respecte la part de Recursos Informàtics: RI consta únicament de proves en línia per a cadascuna de les 20 pràctiques. La nota de cada pràctica tindrà un pes idèntic sobre la nota final de RI. Un no presentat sense justificació vàlida serà puntuat amb un 0. No superar un mínim de 5/10 de mitjana implica un suspens. La manca de lliurament de més de 4 proves implica suspens d'aquesta part i per tant de tota l'assignatura.

## Activitats d'avaluació

| Títol                                                                       | Pes  | Hores | ECTS | Resultats d'aprenentatge                                               |
|-----------------------------------------------------------------------------|------|-------|------|------------------------------------------------------------------------|
| Avaluació en forma de tests (part de Recursos Informàtics)                  | 100% | 21    | 0,84 | 3, 5, 10, 12, 16, 17, 19, 20, 21, 22, 23, 26, 27                       |
| Informe de la pràctica (part Experimentació)                                | 80%  | 15    | 0,6  | 1, 2, 3, 4, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 13, 14, 15, 18, 19, 22, 23, 24, 25, 27 |
| Preparació de les pràctiques. Exercici pre-laboratori (part Experimentació) | 20%  | 3     | 0,12 | 2, 4, 11, 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 "R. H. Petrucci, F.G. Herring, J. D. Madura, C. Bissonnette, Química General, Pearson Prentice Hall (11ena Ed.) 2017" 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. es pot trobar el document online a la següent adreça:

[https://www-ingebook-com.are.uab.cat/ib/NPcd/IB\\_BooksVis?cod\\_primaria=1000187&codigo\\_libro=6751](https://www-ingebook-com.are.uab.cat/ib/NPcd/IB_BooksVis?cod_primaria=1000187&codigo_libro=6751)

- Llibre sobre programació amb Python per a la part de Recursos Informàtics: Learning Python, 5th Edition: Lutz, Mark; O'Reilly Media, Inc. 2013.

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 cinètica) i el bloc 4 (Electroquímica). R. Chang. Química General, 9ª edició, Ed. McGrawHill, 2007.

Altres recursos:

Normes de seguretat als laboratoris docents del Departament de Química:

[http://www.uab.cat/doc/DOC\\_Normativa\\_Segur\\_Lab\\_Docent](http://www.uab.cat/doc/DOC_Normativa_Segur_Lab_Docent)

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/>

Diferents recursos de visualització d'orbitals atòmics i moleculars:  
[http://www.mpcfaculty.net/ron\\_rinehart/orbitals.htm](http://www.mpcfaculty.net/ron_rinehart/orbitals.htm)

## **Programari**

Excel. Full de càlcul.

Gaussian 16. Programa de càlcul d'estructura electrònica.

GaussView 6. programa de visualització molecular.

Python. Llenguatge de programació.

UCSF Chimera. Programa de visualització molecular amb Integració Python.

Jupyter Llibreta. Gestor de programes Python.

Conda. Gestor de paquets python.

Marvin Beans. Visualitzador molecular. Dibuixos 2D i estructures 3D.

Scifinder. Gestor de base de dades científiques.