

Experimentación y Recursos Informáticos

Código: 105034
Créditos ECTS: 8

Titulación	Tipo	Curso	Semestre
2502444 Química	FB	1	A

La metodología docente y la evaluación propuestas en la guía pueden experimentar alguna modificación en función de las restricciones a la presencialidad que impongan las autoridades sanitarias.

Contacto

Nombre: Luis Rodríguez Santiago

Correo electrónico: Luis.Rodriguez.Santiago@uab.cat

Uso de idiomas

Lengua vehicular mayoritaria: catalán (cat)

Algún grupo íntegramente en inglés: No

Algún grupo íntegramente en catalán: Sí

Algún grupo íntegramente en español: No

Equipo docente

Maria Mercè Capdevila Vidal

Jordi Coello Bonilla

Jordi Gené Torrabadella

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 Zapirain Gysling

Montserrat López Mesas

Albert Rimola Gibert

Eva Monteagudo Soldevilla

José Emilio Sánchez Aparicio

Prerequisitos

Dado que se trata de una asignatura de primer curso, no hay prerequisitos académicos para matricularse.

De todas formas, se debe tener en cuenta que la asignatura contiene una gran parte de laboratorio y exige una normativa particular. El comportamiento en el laboratorio tiene que seguir las Normas de Seguridad en los Laboratorios Docentes que publica el Departamento de Química.

Antes de empezar la asignatura los alumnos tienen que hacer el test de seguridad que aparece en el campus virtual y, una vez superado, imprimir y firmar la hoja que lo acredita. Esta hoja se debe entregar el primer día de laboratorio. Sin este documento no se pueden realizar las prácticas.

Las normas se pueden encontrar en la siguiente dirección:
http://www.uab.cat/doc/DOC_Normativa_Segur_Lab_Docent

Durante las prácticas, los alumnos deben llevar puesta la bata de laboratorio y gafas de seguridad homologadas. Sin bata o gafas no pueden hacer la práctica. Además de los utensilios habituales para escribir, tienen que llevar (y saber cómo funciona) una calculadora científica que pueda hacer cálculos de regresión. Es recomendable que vayan en el laboratorio con un ordenador portátil para hacer cálculos con Excel.

Objetivos y contextualización

El objetivo final de la asignatura es que el alumno alcance las competencias indicadas.

La parte de experimentación en el laboratorio tiene unos objetivos generales:

- Conocer y aplicar las normas de seguridad y de trabajo en el laboratorio.
- Conocer el sistema de eliminación de residuos en el laboratorio.
- Conocer el material y utensilios básicos del laboratorio químico.
- Conocer las operaciones básicas del laboratorio químico:
 - Limpieza del material de vidrio
 - Pesada
 - Medida y trasvase de líquidos
 - Preparación de soluciones
 - Calentamiento de sustancias
 - Agitación
 - Evaporación
 - Cristalización
 - Filtrado y lavado de sustancias
 - Extracción Simple
 - Cromatografía de capa fina.
 - Destilación
 - Uso de la libreta de laboratorio.
 - Tratamiento gráfico, numérico e informático de los datos de laboratorio

Como objetivos específicos de cada práctica:

Práctica 1: Tratamiento de datos

- Toma de contacto con los conceptos de error experimental, exactitud y precisión.
- Comprender que el material de vidrio para medir volúmenes puede tener dos funciones diferentes: contener un volumen exacto y transferir un volumen exacto.
- Cálculos de estadística básica.
- Evaluar la precisión y la exactitud de unos resultados.
- Introducción al uso de una hoja de cálculo como herramienta para representar resultados.
- Aprender a pesar con las balanzas siguientes: analítica, de precisión y granetari.
- Aprender las técnicas volumétricas y verificar su precisión.

Práctica 2: Densidades

- Preparar diferentes soluciones de concentración conocida de una sal utilizando diferentes escalas: molaridad, molalidad y tanto por ciento en peso.
- Extraer información a partir del gráfico de concentración y densidad de la disolución.
- Utilizar la regresión por mínimos cuadrados y determinar la concentración de una solución problema a partir de la lectura del gráfico.

- Relacionar molaridad (M), molalidad (m) y tanto por ciento en peso (%).
- Trabajar con diferentes escalas de concentración.

Práctica 3: Reacciones de precipitación. Concepto de reactivo limitante

- Aprender la técnica de filtración para la separación de fases heterogéneas (sólido-líquido).
- Observar el concepto de reactivo limitante con un caso práctico, añadiendo cantidades variables de una sal soluble en la misma cantidad de otra sal soluble (la que actuará de reactivo limitante).
- Observar la insolubilidad de algunas sales a partir de la mezcla de sales solubles.
- Aprender una técnica de purificación de precipitados.

Práctica 4: Reacciones redox. Estequiometría de las reacciones en solución acuosa

- Utilizar el concepto de oxidante y reductor mediante el estudio de reacciones redox simples.
- Recordar las reglas de igualación de reacciones redox.
- Demostrar el comportamiento diferenciado de algunos reactivos en reacciones redox dependiendo de si se trabaja en medio ácido o en medio básico.
- Analizar de forma elemental la solubilidad de las sustancias en diferentes solventes.
- Hacer extracciones líquido-líquido de sustancias de un solvente a otro de diferente polaridad.
- Determinar la concentración de una solución problema usando una reacción redox.

Práctica 5: Determinación de masas atómicas y moleculares

- Aprender a manipular y hacer cálculos con gases.
- Aplicar la ley de gases ideales y la ley de Dalton de las presiones parciales.
- Determinar la masa equivalente y la masa atómica de un metal a partir de una reacción química.
- Determinar la masa molecular de un gas a partir de su densidad.
- Calcular la masa molecular media del aire.
- Trabajar con la presión de vapor del agua al aire y con el concepto de la humedad relativa.

Práctica 6: Uso del calorímetro para estudiar procesos de cambio de fase y de disolución

- Determinar la capacidad calorífica del calorímetro utilizando el método de las mezclas, ya que es un dato que necesitamos conocer para completar esta práctica y las siguientes.
- Determinar el calor latente de fusión del hielo.
- Determinar la entalpía de disolución de dos sustancias líquidas.

Práctica 7: Determinación de calores de reacción y de disolución

- Determinar los calores de reacción (entalpías de reacción) de diferentes procesos químicos (ácido / base y redox) en disolución mediante la utilización de un calorímetro a presión constante.
- Analizar los factores de los que dependen los cambios de entalpía medidos.
- Estudiar la estequiometría de las reacciones de neutralización ácido-base.
- Comparar las entalpías de reacción de las reacciones ácido-base y redox.

Práctica 8: Determinación de la variación de entalpía y de entropía de la disolución de la urea

- El objetivo del experimento es determinar ΔH° y K_{eq} para la disolución de la urea, NH_2CONH_2 , en agua. A partir de esta información, se calculará ΔG° y ΔS° .

Práctica 9: Extracción líquido-líquido y separación de mezclas

- Aprender la técnica de extracción simple.
- Separación de tres sustancias conocidas disueltas en un disolvente orgánico a partir de un proceso de extracción simple aprovechando el diferente carácter ácido-base de las sustancias que se han de separar.
- Comprobación de la eficiencia de la separación mediante la técnica de cromatografía de capa fina.
- Separación de una mezcla binaria desconocida. Se asignará una muestra problema y se dará información al alumno sobre el tipo de compuesto que contiene. Reconocer las sustancias separadas.

Práctica 10: Cinética de la reacción del violeta de metilo en medio básico

- Determinar la pseudo-constante de velocidad k' para la reacción del violeta de metilo en medio básico en exceso de ión hidroxilo y a temperatura ambiente.
- Determinar el orden de la reacción respecto al hidroxilo y el violeta de metilo.
- Determinar la constante de velocidad k para la reacción del violeta de metilo en medio básico.

Práctica 11: Medida del pH. Fuerza relativa de ácidos y bases

- Aprender a utilizar un pH-metro.
- Medir el pH de un conjunto de soluciones acuosas de ácidos y de bases y ordenarlos según su fuerza relativa.
- Observar la influencia de la dilución en el equilibrio.
- Observar el diferente comportamiento entre soluciones amortiguadoras de pH y sistemas no amortiguados a partir de la observación de los cambios de pH cuando se añade un ácido o una base fuertes.

Práctica 12: Volumetrías ácido-base. Indicadores

- Alcanzar la metodología básica para llevar a cabo volumetrías, que en este caso son basadas en equilibrios ácido-base.
- Estudio experimental de la importancia de elegir correctamente el indicador.
- Saber construir una curva de valoración experimental, comprobar que tiene la forma prevista teóricamente, y ver que los indicadores viran en la zona prevista.

Práctica 13: Determinación de la constante de acidez del ácido acético

- En términos generales, el objetivo de este experimento es el estudio cuantitativo del equilibrio químico analizando un equilibrio ácido-base en medio acuoso.
- Determinar la constante de acidez del ácido acético y observar que las constantes de equilibrio corresponden a una realidad "palpable" experimentalmente.
- Aprender a obtener datos cuantitativos a partir de una serie de resultados experimentales que siguen una ley física.

Práctica 14: Solubilidad y K_{ps} de sales poco solubles en agua. Efecto del ión común

- Aprender a preparar una solución saturada de una sal poco soluble de manera controlada.
- Determinar la solubilidad de una sal poco soluble.
- Aprender el concepto práctico del intercambio iónico.
- Determinar el producto de solubilidad de una sal poco soluble.
- Observar y reflexionar sobre el efecto del ión común.

Práctica 15: Celdas Electroquímicas

- Construcción de una Tabla de Potenciales Estándares
- Construcción de Celdas electroquímicas galvánicas sencillas para obtener electricidad a partir de reacciones químicas.

Práctica 16: Síntesis del ácidoacetilsalicílico

- Sintetizar una cierta cantidad de ácido acetilsalicílico (AAS) a partir del ácido salicílico (AS) comercial.
- Purificar el producto de la reacción (AAS).
- Determinar el rendimiento de la reacción.
- Discutir, de manera cualitativa, la pureza del producto obtenido.

Por la parte de Recursos Informáticos el objetivo general es dar una base sólida a los alumnos en competencias transversales y específicas de las herramientas informáticas. Se pretende que los estudiantes adquieran unas fuertes nociones tanto estructurales como analíticas en la gestión de base de datos y algoritmos.

Competencias

- Adaptarse a nuevas situaciones.
- Aplicar los conocimientos químicos a la resolución de problemas de naturaleza cuantitativa o cualitativa en ámbitos familiares y profesionales.
- Aprender de forma autónoma.
- Comunicarse de forma oral y escrita en la lengua nativa.
- Demostrar iniciativa y espíritu emprendedor.
- Demostrar motivación por la calidad.
- Demostrar que comprende los conceptos, principios, teorías y hechos fundamentales de las diferentes áreas de la Química.
- Evaluar los riesgos sanitarios y el impacto ambiental y socioeconómico asociado a las sustancias químicas y la industria química.
- Gestionar la organización y planificación de tareas.
- Gestionar, analizar y sintetizar información.
- Interpretar los datos obtenidos mediante medidas experimentales, incluyendo el uso de herramientas informáticas, identificar su significado y relacionarlos con las teorías químicas, físicas o biológicas apropiadas.
- Manejar instrumentos y material estándares en laboratorios químicos de análisis y síntesis.
- Manipular con seguridad los productos químicos.
- Mantener un compromiso ético.
- Mostrar sensibilidad hacia temas medioambientales.
- Obtener información, incluyendo la utilización de medios telemáticos.
- Poseer destreza para el cálculo numérico.
- Proponer ideas y soluciones creativas.
- Razonar de forma crítica.
- Reconocer y analizar problemas químicos y plantear respuestas o trabajos adecuados para su resolución, incluyendo en casos necesarios el uso de fuentes bibliográficas.
- Resolver problemas y tomar decisiones.
- Utilizar correctamente la lengua inglesa en el ámbito de la Química.
- Utilizar la informática para el tratamiento y presentación de información.

Resultados de aprendizaje

1. Adaptarse a nuevas situaciones.
2. Aprender de forma autónoma.
3. Comunicarse de forma oral y escrita en la lengua nativa.
4. Demostrar iniciativa y espíritu emprendedor.
5. Demostrar motivación por la calidad.
6. Determinar concentraciones de ácidos y bases a partir de valoraciones ácido-base.
7. Gestionar la organización y planificación de tareas.
8. Gestionar, analizar y sintetizar información.
9. Identificar las medidas de seguridad en un laboratorio químico.
10. Identificar las principales fuentes bibliográficas en el ámbito de la Química.
11. Llevar a cabo procedimientos de síntesis, separación y análisis básicos en un laboratorio de Química.
12. Manipular correctamente el material de vidrio en un laboratorio de Química.
13. Mantener un compromiso ético.
14. Mostrar sensibilidad hacia temas medioambientales.
15. Nombrar y formular los compuestos químicos orgánicos e inorgánicos.
16. Obtener información, incluyendo la utilización de medios telemáticos.
17. Poseer destreza para el cálculo numérico.
18. Proponer ideas y soluciones creativas.
19. Racionalizar los resultados obtenidos en el laboratorio en procesos de síntesis, separación y análisis de compuestos químicos a partir del conocimiento de su estructura y propiedades.
20. Razonar de forma crítica.
21. Realizar búsquedas bibliográficas de documentación química.

22. Realizar consultas bibliográficas en el ámbito de la Química en fuentes de información en lengua inglesa y reconocer los términos básicos en Química en este idioma.
23. Resolver problemas y tomar decisiones.
24. Trabajar correctamente con ecuaciones químicas y con las principales magnitudes de la materia.
25. Utilizar correctamente los protocolos de manipulación de reactivos y residuos químicos teniendo en cuenta sus propiedades físicas y químicas.
26. Utilizar la informática para el tratamiento y presentación de información.
27. Utilizar programas informáticos para el tratamiento estadístico de datos.

Contenido

La asignatura consta de dos partes diferenciadas: Experimentación en el laboratorio (5 ECTS) y Recursos Informáticos (3 ECTS).

Cada una de las partes tiene un contenido específico. La experimentación en el laboratorio está estructurada en 3 bloques, y cada uno consta de varias prácticas en el laboratorio. La parte de Recursos Informáticos consta de

PRÁCTICAS DE EXPERIMENTACIÓN EN QUÍMICA

BLOQUE 1: Introducción a la experimentación en Química

Práctica 1: Tratamiento de datos. Medida de volúmenes. Errores experimentales. Uso de Excel para hacer gráficas y cálculos

Práctica 2: Densidades. Determinación de la concentración de una disolución a partir de su densidad. Uso de excel para hacer gráficas y regresiones lineales

Práctica 3: Reacciones de precipitación. Concepto de reactivo limitante. Rendimiento de reacciones de precipitación de CaCO_3

Práctica 4: Reacciones redox. Estequiometría de las reacciones en solución acuosa. Reacciones redox en tubo de ensayo. Determinación de la concentración de una solución problema mediante una reacción redox.

Práctica 5: Determinación de masas atómicas y moleculares. Determinación de la masa molecular de un gas. Determinación de la masa equivalente y la masa atómica de un metal.

BLOQUE 2: Termodinámica y cinética

Práctica 6: Uso del calorímetro para estudiar procesos de cambio de fase. Calibración de un termómetro digital. Cálculo de la capacidad calorífica del calorímetro. Determinación del calor de fusión del hielo.

Práctica 7: Determinación de calores de reacción. Determinación de entalpías de neutralización en reacciones ácido-base y de entalpías de disolución.

Práctica 8: Determinación de la variación de entalpía y de entropía de la disolución de la urea. Cálculo de la energía libre de Gibbs y de la constante de la reacción de la disolución de urea en agua.

Práctica 9: Extracción líquido-líquido y separación de mezclas. Separaciones de mezclas conocidas y desconocidas de dos y tres componentes. Identificación por cromatografía de capa delgada.

Práctica 10: Cinética. Cinética de la reacción del violeta de metilo en medio básico. Estudio de la cinética de la reacción siguiendo espectrofotométricamente la concentración del violeta de metilo. Cálculo del orden de la reacción y de la constante de velocidad.

BLOQUE 3: Equilibrio químico, electroquímica y grupos funcionales orgánicos

Práctica 11: Medida del pH. Fuerza relativa de ácidos y bases. Calibración y uso de un pH-metro. Estudio de concepto de tampón. Cálculo del grado de disociación de un ácido débil.

Práctica 12: Volumetrías ácido-base. Indicadores. Realización de volumetrías ácido-base con indicadores y con seguimiento potenciométrico. Cómo elegir el indicador adecuado para una valoración.

Práctica 13: Determinación de la constante de acidez del ácido acético. Aplicación del método de las diluciones. Uso de un método gráfico y el ajuste por mínimos cuadrados para encontrar una constante

de disociación.

Práctica 14: Solubilidad y K_{ps} de sales poco solubles en agua. Efecto del ión común. Determinación de la solubilidad de $PbCl_2$ en agua. Preparación y uso de resinas de intercambio iónico. Determinación de la K_{ps} del $PbCl_2$. Efecto del ión común.

Práctica 15: Celdas Electroquímicas. Construcción de celdas galvánicas. Cálculo de tablas de potenciales.

Práctica 16: Síntesis del ácido acetilsalicílico. Obtención y purificación del producto a partir de ácido salicílico comercial.

El contenido de la parte de Recursos Informáticos incluye las siguientes prácticas:

Bloque A Excel Básico

Práctica 1. Introducción a Excel, organización de datos, abrirse importar exportar datos, presentación general del software, cálculos elementales, formato y formato condicional, ajustar decimales, ordenar, aplicar filtros ordenación.

Práctica 2. Fórmulas estadísticas (variabilidad en función idioma software), fórmulas lógicas.

Práctica 3. Gráficos, histogramas, barras, x-y, ajustes línea / curva de tendencia.

Práctica 4. Plantillas y formularios.

Bloque B Estructuras y bases de datos

Práctica 5. Fichas de seguridad

Práctica 6. Introducción dibujo molecular 2D.

Práctica 7. Geometría 3D, exploración de conformaciones, perspectivas, etc...

Práctica 8. Orbitales atómicos y moleculares.

Práctica 9. Análisis de estructuras de sólidos.

Práctica 10. Scifinder.

bloque C Excel Avanzado

Práctica 10. Tablas dinámicas.

Práctica 11. Análisis de datos.

Práctica 12. Regresión múltiple. Cálculos iterativos y "Busqueda de Objetivos".

Práctica 13. Cálculos avanzados empleando Solver.

bloque D Programación en el ámbito molecular

Práctica 15. Introducción a Linux. Introducción a Python.

Práctica 16. Programación en Python 1.

Práctica 17. Programación en Python 2.

Práctica 18. Integración Python en ámbitos químicos 1 - Módulos científicos y resolución de problemas químicos.

Práctica 19. Integración Python en ámbitos químicos 2 - Módulos científicos y resolución de problemas químicos.

Práctica 20. Integración Python en ámbitos químicos 3 - Visualización molecular y UCSF Chimera.

Metodología

La asignatura "Experimentación y Recursos Informáticos" cuenta de dos grandes partes. Una de experimentación que se centra con trabajos de Laboratorios químicos. El otro de recursos informáticos que se orienta a la adquisición de conocimientos y competencias de herramientas informáticas fundamentales para realizar análisis de datos, llevar a cabo búsquedas de fondos bibliográficos, introducir conceptos avanzados de seguridad y generación materiales de apoyo del ámbito químico (dibujo molecular, modelo).

La asignatura "Experimentación y Recursos Informáticos" (8 ECTS), junto con las asignaturas "Fundamentos de Química I" y "Fundamentos de Química II" (16 ECTS), forma parte de la materia "Química" del grado de Química, que tiene un total de 24 ECTS de carácter básico y está situada en el primer curso del Plan de Estudios. Las asignaturas son totalmente independientes respecto a la evaluación, pero están coordinadas, de forma que la evaluación de la parte de las asignaturas "Fundamentos de Química I y II" que está relacionada con las prácticas, se hace después de terminar el bloque de prácticas correspondiente. Así las prácticas se benefician de tener las explicaciones teóricas cercanas al tiempo y sirven para acabar de entender la teoría.

Experimentación.

Las prácticas de laboratorio de la parte de Experimentación constan de 3 bloques, después de que en la asignatura de teoría se trate el tema específico. Cada bloque de laboratorio tiene varias prácticas, de 4h cada una, que se realizan en los laboratorios del Departamento de Química o en la Sala de Ordenadores de la Facultad. La última sesión del bloque se dedica a la corrección y comentario de las prácticas realizadas. Antes de comenzar las prácticas habrá una sesión conjunta en un aula donde se recordarán las normas que aparecen en esta Guía Docente y las informaciones de última hora.

Los días que se hacen las prácticas de laboratorio de esta asignatura no hay clases de teoría.

Las prácticas de laboratorio se hacen en parejas y cada bloque de prácticas cambian los compañeros de las parejas. Para cada bloque de prácticas, los guiones y la lista de parejas se publican en el campus virtual. Las evaluaciones son individuales.

La asistencia es obligatoria. Una falta no justificada implica un cero de la práctica. Los alumnos deben entrar en el laboratorio con el guión de la práctica leído y con los cálculos que pide la preparación de disoluciones planteados desde casa. Es posible que tengan que realizar un corto test (menos de 10 minutos) para comprobar que realmente han leído el guión.

Antes de cada práctica, el profesor explicará los puntos más importantes y los detalles a tener en cuenta.

Una vez terminada la práctica y ordenado el material, los alumnos llenan, de manera individual, el informe de la práctica y contestan las cuestiones que se plantean para su evaluación. Puede que, en algunos casos concretos, los alumnos lleven el informe a casa para poder hacer los cálculos con más tranquilidad y la entreguen al día siguiente.

El espacio de la asignatura en el Campus Virtual será el lugar donde los alumnos podrán encontrar toda la documentación necesaria para las prácticas. Antes de empezar el primer bloque de prácticas estará publicado: las normas de seguridad en el laboratorio y el libro de prácticas, que contiene una primera parte explicativa de las técnicas habituales en el laboratorio y los guiones de todas las prácticas.

Antes de comenzar la asignatura, los alumnos deben hacer el test de seguridad que aparece en el campus virtual y, una vez superado, imprimir y firmar la hoja que lo manifiesta. Esta hoja se entregará el primer día en el laboratorio. Sin este documento no se pueden realizar las prácticas.

Puntualmente, antes de cada bloque, se publicará el calendario y lista de parejas específica del bloque. Posteriormente se publicarán las calificaciones del bloque.

Recursos informáticos

La parte de Recursos Informáticos consta de 20 sesiones de prácticas.

El procedimiento estándar será:

1. Unos días antes de la clase, el alumnado recibe material de introducción a los conocimientos teóricos y prácticos de la práctica. (Vídeos introductorios por parte del profesorado, documentos de estudios, enlaces internet, etc.). Puede incluir ejercicios básicos a resolver.

2. El día programado de las clases, los/las profesor/e/s recapitulan los conceptos fundamentales y desarrollan casos prácticos.

3. Al final de la clase, los alumnos deberán resolver una prueba on-line de forma presencial y de duración de entre 10 a 20 minutos.

Las prácticas son obligatorias y se podrán realizar de manera individual o grupal según lo indique el profesorado. Una falta no justificada implica un cero a la práctica. El equipo profesorado se reserva el derecho de llevar a cabo evaluaciones adicionales a los programados de cada sesión.

Nota: se reservarán 15 minutos de una clase dentro del calendario establecido por el centro o por la titulación para que el alumnado rellene las encuestas de evaluación de la actuación del profesorado y de evaluación de la asignatura o módulo.

Actividades

Título	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
Tipo: Dirigidas			
Prácticas aula informática/tutorización online (según situación sanitaria)	40	1,6	1, 15, 2, 3, 4, 5, 6, 11, 7, 8, 10, 16, 19, 20, 22, 21, 23, 17, 24, 25, 26, 27
Realización de las prácticas en el laboratorio (según situación sanitaria)	74	2,96	1, 15, 2, 3, 4, 5, 6, 11, 7, 9, 12, 16, 18, 19, 20, 23, 17, 24, 25, 27
Teoría	1	0,04	15, 7, 9, 24
Tipo: Autónomas			
Lectura de los guiones y preparación de las prácticas de laboratorio (parte experimentación)	18	0,72	15, 2, 7, 8, 20, 17, 24
Resolución de problemas relacionados con la parte de Recursos Informáticos	28	1,12	2, 3, 4, 5, 7, 8, 16, 18, 20, 22, 23, 17, 26, 27

Evaluación

Todas las actividades que se realizan cuentan para la evaluación.

Las dos partes de la asignatura tienen una evaluación individual e independiente. La calificación final es la media de las notas de las dos partes de la asignatura, ponderada por el número de créditos de cada parte.

Es necesario aprobar las dos partes para aprobar la asignatura.

Respecto a la parte de Experimentación en el laboratorio: Se sigue un sistema de evaluación continua, sin posibilidad de reevaluación con un trabajo o examen especial. La nota mínima para superarla es de 5 puntos (sobre 10). En esta nota el peso más importante son los informes que se entregan al final de cada práctica (peso 80%). En el informe se deben poner los resultados experimentales obtenidos en la práctica y contestar las preguntas que se piden, dejando constancia de los gráficos y cálculos necesarios. Se valora la metodología seguida para las respuestas, la forma con que se comunican las respuestas y la bondad de los datos experimentales encontradas. También se tendrán en cuenta las pruebas previas (antes de empezar cada práctica) para demostrar que se ha leído los informes y la actitud de trabajo en el laboratorio (peso 20%).

La no asistencia a la sesión de corrección y comentario de las prácticas del bloque tiene una penalización de 1 punto (sobre 10) en la nota del bloque. La nota final de esta parte será la media de las notas de todos los bloques.

La asistencia es obligatoria. Una falta no justificada implica un cero de la práctica.

Advertencia sobre seguridad en el laboratorio: El estudiante que se vea involucrado en un incidente que pueda tener consecuencias graves de seguridad podrá ser expulsado del laboratorio y suspender la asignatura.

Respecto la parte de Recursos Informáticos: RI consta únicamente de pruebas online para cada una de las 20 prácticas. La nota de cada práctica tendrá un peso idéntico sobre la nota final de RI. Un no presentado sin justificación válida será puntuado con un 0. No superar un mínimo de 5/10 de mediana implica un suspenso. La falta de entrega de más de 4 pruebas implica suspenso de esta parte y por tanto de toda la asignatura.

Actividades de evaluación

Título	Peso	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
Evaluación el forma de tests (parte de Recursos Informáticos)	100%	21	0,84	2, 4, 8, 10, 16, 18, 20, 22, 21, 23, 17, 26, 27
Informe de la práctica (parte Experimentación)	80%	15	0,6	1, 15, 2, 3, 5, 6, 11, 7, 8, 9, 12, 13, 14, 19, 20, 23, 17, 24, 25, 27
Preparación de las prácticas. Ejercicio pre-laboratorio (parte Experimentación)	20%	3	0,12	15, 3, 9, 17, 24

Bibliografía

Textos principales de referencia:

- El documento principal para la parte de laboratorio es el "Libro de prácticas de la asignatura Experimentación en Química". Departamento de Química. Contiene la información necesaria para trabajar en el laboratorio y los guiones de todas las prácticas. Cada práctica indica que conceptos del libro deben repasar. Se encuentra en el Campus Virtual de la UAB.

- El libro de texto " R. H. Petrucci, F.G. Herring, J. D. Madura, C. Bissonnette, Química General, Pearson Prentice Hall (11ena Ed.) 2017" proporcionará la información teórica necesaria para cada práctica. En el guión de cada una está la indicación de las páginas del libro que se debe leer. El documento digital se puede encontrar en el siguiente enlace:

https://www-ingebook-com.are.uab.cat/ib/NPcd/IB_BooksVis?cod_primaria=1000187&codigo_libro=6751

- Libro sobre programación con Python para la parte de Recursos Informáticos: Learning Python, 5th Edition: Lutz, Mark; O'Reilly Media, Inc. 2013.

Textos complementarios:

- Un libro de prácticas de laboratorio que se puede buscar en la biblioteca por si no queda claro alguno de los experimentos. Manuel Fernández González, Operaciones de Laboratorio de Química, Ed. Anaya (2004).

-Un libro de texto que se encuentra en la biblioteca y que contiene explicaciones sobre el uso de Excel, cifras significativas e información complementaria sobre el bloque 4 (Equilibrio Químico). Daniel C. Harris. "Análisis químico cuantitativo". Ed. Reverté S.A. Barcelona (2006)

- Un libro que se encuentra en la biblioteca y que aporta más información sobre el bloque 3 (Termodinámica y cinética) y el bloque 4 (Electroquímica). R. Chang. Química General, 9ª edición, Ed. McGraw-Hill, 2007.

Otros recursos:

Normas de seguridad en los laboratorios docentes del Departamento de Química:
http://www.uab.cat/doc/DOC_Normativa_Segur_Lab_Docent

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

Análisis de propiedades: EI, AE, densidad, conductividad eléctrica: <http://www.webelements.com/> y <http://www.dayah.com/periodic/>

Diferentes recursos de visualización de orbitales atómicos y moleculares:
http://www.mpcfaculty.net/ron_rinehart/orbitals.htm

Software

Excel. Hoja de cálculo.

Gaussian 16. Programa de cálculo de estructura electrónica.

GaussView 6. Programa de visualización molecular.

Python. Lenguaje de programación.

UCSF Chimera. Programa de visualización molecular amb integració Python.

Jupyter Notebook. Gestor de programas Python.

Conda. Gestor de paquetes python.

Marvin Beans. Visualizador molecular. Dibujos 2D i estructures 3D.

Scifinder. Gestor de base de datos científicos.