CURSO: 2006/07
CENTRO: FAC. CC. EXPERIMENTALES
ESTUDIOS: LICENCIADO EN CIENCIAS QUÍMICAS
ASIGNATURA: **METODOLOGÍA EXPERIMENTAL EN QUÍMICA FÍSICA**
CÓDIGO: 5007304
CICLO: 1º
CURSO: OPT
CUATRIMESTRE: 1º
CARÁCTER: OPTATIVA
CRÉDITOS TEÓR.: 3,00
CRÉDITOS PRÁC.: 3,00

ÁREA: QUÍMICA FÍSICA
DEPARTAMENTO: QUÍMICA FÍSICA, BIOQUÍMICA Y QUÍMICA INORGÁNICA
DESCRIPTORES: MÉTODOS QUÍMICO-CUÁNTICOS DE CÁLCULO PARA SISTEMAS MOLECULARES. FUNDAMENTOS QUÍMICO-FÍSICOS DE LAS TÉCNICAS: POTENCIOMÉTRICAS, CROMATOGRÁFICAS, CONDUCTIMÉTRICAS, ESPECTROFOTOMÉTRICAS Y CALORIMÉTRICAS.

TEMARIO DE TEORÍA

TEMA 1. TRATAMIENTO DE LOS DATOS EXPERIMENTALES. Cálculos y presentación de los datos. Errores. Búsqueda en bases de datos. Artículos de investigación.

TEMA 2. CALCULOS QUÍMICO-FÍSICOS CON EL ORDENADOR. Hojas de cálculo. Programas gráficos y matemáticos. Programas para cálculos mecano-cuánticos.

TEMA 3. PROCEDIMIENTOS DE AJUSTE POR MÍNIMOS CUADRADOS. Introducción. Fundamentos de los mínimos cuadrados. Bondad del ajuste. Rechazo de datos discordantes. Comparación de modelos. Ejemplos de ajustes por mínimos cuadrados.

TEMA 4. ADQUISICIÓN DE DATOS A TRAVÉS DE ORDENADOR. Hardware. Software. Lenguajes de programación. Interfaz instrumento ordenador.

TEMA 5. APARATOS ELECTRÓNICOS Y MEDIDA. Elementos de un circuito. Semiconductores. Amplificadores. Conversión analógico digital. Circuitos potenciométricos. El puente de Wheastone.

TEMA 6. INSTRUMENTOS. Balanzas. Barómetros. Osciloscopios. pHmetros. Polarímetros. Contadores de radiación. Refractómetros. Componentes e instrumentos espectroscópicos. Cromatógrafos. Calorímetros.

TEMARIO DE PRÁCTICAS

PRACTICA 1. DETERMINACIÓN DE LA ECUCIÓN DE VELOCIDAD. MECANISMO DE LA REACCIÓN.

Se llevará a cabo la determinación de la ecuación de velocidad de la reacción:

$$IO^-_3 + 8\ I^- + 6\ H^+ \rightarrow 3I^-_3 + 3\ H_2O$$

La cinética de la reacción se seguirá mediante medidas de la absorbancia.

- Sesión 1: preparación de disoluciones.
- Sesión 2: medidas.
- Sesión 3: cálculos y discusión de los resultados.

PRACTICA 2. ESPECTRO DE ABSORCIÓN DE UN COLORANTE CONJUGADO.

Se estudiarán los tránsitos energéticos que dan lugar al espectro visible de un colorante conjugado.

- Sesión 1: preparación de disoluciones.
- Sesión 2: medidas.

- Sesión 3: cálculos y discusión de los resultados.
- Sesión 4: cálculos mecano-cuánticos con ayuda de programas informáticos.

PRACTICA 3. SEPARACIÓN CROMATOGRÁFICA DE CLOROFILAS.

Se llevará acabo la separación cromatográfica de clorofilas procedentes de hojas de espinaca por cromatografía en una columna de alúmina.

- Sesión 1: preparación de disoluciones.
- Sesión 2: separación cromatográfica y cuantización de las clorofilas mediante medidas espectroscópicas.
- Sesión 3: cálculos y discusión de los resultados.

PRACTICA 4. CÁLCULOS QUÍMICO-FÍSICOS POR ORDENADOR. CONSULTA DE BASES DE DATOS

Se enseñará al alumno el uso de programas de cálculo, para su aplicación al procesado de datos químico físicos.

- Sesión 1: Introducción práctica a los sistemas operativos y a los lenguajes de programación.
- Sesión 2: Programas de cálculo.
- Sesión 3: Consulta de bases de datos.

Cada sesión tiene una duración de 150 minutos.

BIBLIOGRAFÍA

🕮 Shoemaker, D.P, Garland, C.W. and Nibler, J.W. (1996) EXPERIMENTS IN PHYSICAL CHEMISTRY, McGraw-Hill, 6ª Edición.

🕮 Cámara-Artigas, Ana. Guiones de prácticas de la asignatura: METODOLOGÍA EXPERIMENTAL EN QUÍMICA FÍSICA.

CRITERIOS DE EVALUACIÓN

Se realizará un examen escrito sobre los contenidos teóricos y se evaluarán los resultados prácticos obtenidos, así como un trabajo monográfico. La calificación final será la media de los tres apartados anteriores, siendo necesario al menos un cuatro en cada una de las partes para realizar la media.