

Plan 472 GRADO EN QUIMICA

Asignatura 45952 QUÍMICA EXPERIMENTAL II

Grupo 1

### Tipo de asignatura (básica, obligatoria u optativa)

Obligatoria

### Créditos ECTS

Seis (6)

### Competencias que contribuye a desarrollar

Generales:

- G.1- Ser capaz de comunicarse con corrección tanto de forma oral como escrita.
- G.2- Ser capaz de resolver problemas tanto de naturaleza cualitativa como cuantitativa y de tomar decisiones.
- G.3- Ser capaz de encontrar y manejar información, tanto de fuentes primarias como secundarias.
- G.4- Ser capaz de trabajar de forma eficaz y autónoma mediante la planificación y la organización de su trabajo y de su tiempo.
- G.5- Ser capaz de trabajar en equipo, apreciando el valor de las ideas de otras personas para enriquecer un proyecto, sabiendo escuchar las opiniones de otros colaboradores.
- G.6- Conseguir usar con destreza las tecnologías de la información, en lo que se refiere al software más habitual, recursos audiovisuales e Internet.
- G.7- Alcanzar un manejo del idioma inglés suficiente para leer y comunicarse, en aspectos generales y también específicos de su campo científico.
- G.8- Poseer los hábitos, capacidad de aprendizaje y autonomía necesarios para proseguir su formación posterior.
- G.9- Conocer y apreciar las responsabilidades éticas y profesionales

Específicas

1) Conocimiento de la disciplina:

Los aspectos básicos en los que un graduado en química debe ser competente y que ha de conocer de la disciplina son los que aquí se recogen. Estas competencias, referidas al conocimiento, se diversificarán en aspectos más concretos en cada materia y asignatura, de modo que las competencias adquiridas en todas ellas resulte en el conjunto que se enumera a continuación:

- EC.1- Conocer y manejar los aspectos principales de terminología química.
- EC.2- Conocer la Tabla Periódica, su utilidad y las tendencias periódicas en las propiedades de los elementos.
- EC.3- Conocer los modelos y principios fundamentales de enlace entre los átomos, los principales tipos de compuestos a que esto da lugar y las consecuencias en la estructura y propiedades de los mismos.
- EC.4- Comprender los principios fisicoquímicos que rigen las reacciones químicas y conocer los tipos fundamentales de reacciones químicas.
- EC.5- Conocer los principales tipos de compuestos orgánicos e inorgánicos
- EC.6- Conocer los procesos generales de síntesis, aislamiento y purificación de sustancias químicas.
- EC.7- Conocer los métodos fundamentales de análisis y caracterización estructural de compuestos químicos.

2) Habilidades y destrezas relacionadas con la Química:

2.1) Habilidades cognitivas:

- EH.1- Ser capaz de demostrar el conocimiento y comprensión de conceptos, principios y teorías esenciales en relación con la química.
- EH.2- Ser capaz de aplicar los conocimientos adquiridos a la resolución de problemas cualitativos y cuantitativos.
- EH.3- Ser capaz de reconocer y analizar un problema y plantear estrategias para su resolución.
- EH.4- Ser capaz de analizar, interpretar y evaluar información química y datos químicos.
- EH.5- Ser capaz de comunicar información química y argumentar sobre ella.
- EH.6- Manejar las herramientas computacionales y de tecnología de la información básicas para el procesamiento de datos e información química.
- b.2) Habilidades prácticas:
- EH.7- Manipular con seguridad materiales químicos atendiendo a sus propiedades físicas y químicas y evaluar los riesgos que conlleva su uso.
- EH.8- Ser capaz de llevar a cabo en el laboratorio un procedimiento previamente descrito tanto de carácter sintético

como analítico.

EH.9- Aplicar con rigor los métodos de observación, medida y documentación de los procedimientos de trabajo en el laboratorio.

EH.10- Manejar la instrumentación básica de laboratorio.

## Objetivos/Resultados de aprendizaje

Como resultado de la realización de las actividades formativas anteriores y teniendo en cuenta los contenidos de la materia, los alumnos han de ser capaces de:

- Manipular los reactivos químicos y compuestos inorgánicos con seguridad.
- Conocer los procedimientos básicos de síntesis y purificación de compuestos inorgánicos (sales y complejos de coordinación sencillos) y ser capaces de llevarlas a cabo.
  - Planificar y llevar a cabo experimentalmente síntesis sencillas de compuestos inorgánicos utilizando las técnicas adecuadas.
  - Asignar y determinar la estructura de los distintos tipos de compuestos inorgánicos.
  - Interpretar los datos procedentes de las reacciones químicas en el laboratorio en términos de su significación y de las teorías que la sustentan.
  - Conocer los principios y precauciones que se deben tomar para trabajar con seguridad con los láseres e instrumentación espectroscópica.
  - Conocer la aplicación de los principios de la Mecánica Cuántica a la descripción de las propiedades de los átomos y las moléculas.
  - Conocer los fundamentos de la interacción radiación-materia, el origen de los fenómenos espectroscópicos, su fundamento cuántico y las diferentes técnicas de investigación estructural.
    - Adquirir destreza en el manejo de las principales técnicas espectroscópicas modernas empleadas en química, conocer qué información proporcionan, en qué condiciones son aplicables y poder determinar a través del trabajo experimental las propiedades estructurales de los sistemas químicos.
    - Adquirir destreza en el manejo de programas informáticos de cálculo de propiedades microscópicas de la materia y programas de simulación.
    - Adquirir destreza en el tratamiento y propagación de errores de las magnitudes medidas en el laboratorio y en el manejo de programas informáticos para llevar a cabo el tratamiento de datos experimentales.
    - Comprender y utilizar la información bibliográfica y técnica referida a los fenómenos químicos.

Estos resultados implican la adquisición, de forma completa o parcial de las competencias que se indican más arriba (algunas competencias se adquieren o perfeccionan a lo largo de todo el periodo formativo del grado).

## Contenidos

Bloque 1:

Ensayos de reactividad

- Reactividad de metales
- Reactividad de los halógenos

Síntesis

- Preparación de tiosulfato y tetrionato sódicos
- Preparación y caracterización de algunos compuestos de cromo (alumbre,  $[\text{Cr}(\text{H}_2\text{O})_6]\text{Cl}_3$ )
- Preparación de algunos complejos y sales de cobre:  $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_4]\text{SO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$   $\text{Cu}(\text{NH}_4)_2(\text{SO}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  y  $\text{CuCl}$ .
- Preparación de  $\text{K}_3[\text{Fe}(\text{ox})_3] \cdot 3\text{H}_2\text{O}$
- Síntesis de gel de sílice y crecimiento de silicatos con sales metálicas
- Reacción en estado sólido de óxido de cobre con cinc metálico

Bloque 2:

- Modelo del electrón libre. Molécula de b-caroteno.
- Método semiempírico de Hückel. Predicciones moleculares para moléculas aromáticas y haloderivados.
- Modelización de orbitales moleculares y transiciones electrónicas. Tratamiento mecanocuántico de las moléculas de acetaldehído, acetona, ácido acético, cloruro de acetilo y acetofenona.
- Modelización de vibraciones moleculares y transiciones infrarrojas. Cálculo de las moléculas del agua, monóxido de carbono, dióxido de carbono y cloruro de hidrógeno.
- Curva de potencial de moléculas diatómicas. Moléculas del dióxido de carbono y cloruro de hidrógeno.
- Espectros atómicos. Espectros del hidrógeno, helio y sodio.
- Espectros de rotación-vibración de moléculas diatómicas y triatómicas. Espectros de las moléculas del cloruro de hidrógeno, monóxido de carbono, dióxido de carbono y agua.
- Espectros vibrónicos de diatómicas. Espectro del yodo.
- Transiciones electrónicas n-p\* del grupo carbonilo. Espectros de las moléculas del acetaldehído, acetona, ácido acético, cloruro de acetilo y acetofenona.
- Procesos bimoleculares de desactivación fluorescente. Curva de desactivación fluorescente de la acridina.

## Principios Metodológicos/Métodos Docentes

Se trata de una asignatura experimental basada en sesiones presenciales en los Laboratorios de Prácticas de las Áreas de Química Física y Química Inorgánica, siendo su forma de impartirla la común en este tipo de asignaturas. Se comienza con un planteamiento del trabajo a realizar, anotando claramente el procedimiento a seguir en el cuaderno de laboratorio, la realización del mismo y el análisis de los resultados. Al final se comenta con el alumno el proceso realizado (individualmente), y se elabora un pequeño cuestionario sobre cada una de las experiencias.

## Crterios y sistemas de evaluación

La evaluación se realizará en dos bloques independientes correspondientes a las dos áreas.

Dentro del bloque de Química Inorgánica la evaluación de los alumnos se realizará mediante: (a) Seguimiento continuo del trabajo del alumno en el laboratorio. Se valorará el cumplimiento de las obligaciones (asistencia, puntualidad...), el trabajo experimental (resultados obtenidos, uso correcto del material, limpieza, cumplimiento de las normas de seguridad...), cuaderno de laboratorio (claridad y exactitud de las anotaciones y observaciones, corrección en la interpretación de resultados...) y las respuestas a las cuestiones.(b) Examen final, que tendrá una parte teórica y una práctica. En la calificación final tendrá un peso equivalente la nota obtenida en el examen final y la nota de la evaluación continua.

Dentro del bloque de Química Física la evaluación tendrá en cuenta: (a) Seguimiento continuo del trabajo del alumno en el laboratorio. Se valorará la preparación de la práctica y el trabajo experimental (resultados obtenidos, uso correcto del material, limpieza, cumplimiento de las normas de seguridad, etc.). (b) Cuaderno de laboratorio (claridad y exactitud de las anotaciones y observaciones, corrección en la interpretación de resultados...). (c) Informe final de prácticas, incluyendo las respuestas a las cuestiones planteadas en cada una de ellas. (d) Presentación de una de las prácticas en formato de publicación científica (Introducción, aspectos teóricos, resultados, discusión, conclusiones y bibliografía). (e) Examen final. La valoración de estos apartados será: (a) 30%, (b) 10%, (c) 10%, (d) 20%, (e) 30% La nota final será un promedio de las calificaciones de ambos bloques., siempre que estén ambos aprobados o uno suspenso con calificación superior a 4.

## Recursos de aprendizaje y apoyo tutorial

Las herramientas y programas actuales dentro de las nuevas directrices de Docencia.

La tutorías personalizadas se encuentran en la Web de la Facultad de Ciencias

## Calendario y horario

En el segundo cuatrimestre en horario de 16 a 20 h.

Los distintos turnos serán expuestos con antelación en el tablón de anuncios correspondiente al Grado en Química de la Facultad de Ciencias.

## Tabla de Dedicación del Estudiante a la Asignatura/Plan de Trabajo

ACTIVIDADES PRESENCIALES

HORAS

ACTIVIDADES NO PRESENCIALES

HORAS

Clases teórico-prácticas (T/M)

Estudio y trabajo autónomo individual

25

Clases prácticas de aula (A)

Estudio y trabajo autónomo grupal

20

Laboratorios (L)

84

Realización de informes

10

Prácticas externas, clínicas o de campo

Seminarios (S)

5

Tutorías grupales (TG)

Evaluación

6

Total presencial

95

Total no presencial

55

**Responsable de la docencia (recomendable que se incluya información de contacto y breve CV en el que aparezcan sus líneas de investigación y alguna publicación relevante)**

**CURRICULUM VITAE ABREVIADO:** Dr. Jesús Angel Miguel García

Catedrático de Universidad (desde 19-06-2012)

Departamento de Química Física y Química Inorgánica. Universidad de Valladolid

Correo electrónico: jamiguel@qi.uva.es

teléfono 983 186421

Méritos de docencia reconocidos: 6 quinquenios

Méritos de investigación reconocidos: 5 sexenios

a) Formación académica y puestos anteriores

Licenciado en Ciencias Químicas (1979). Universidad de Valladolid

Doctor en Ciencias Químicas (1988). Universidad de Oviedo

Profesor Ayudante (desde Feb-83 hasta Nov-91). Universidad de Valladolid

Prof. Titular Interino (desde Dic-91 hasta Feb-93)

Prof. Titular de Universidad (desde Feb. 1993-Jun-2012)

Líneas, proyectos y contratos de investigación (último quinquenio):

a) Líneas de Investigación: Metalomesógenos, Óptica No Lineal, Materiales Luminiscentes

b) Proyectos y contratos de investigación:

Título del proyecto: Agregados nanoestructurados funcionales: Cristales Líquidos, sistemas luminiscentes y nanopartículas metálicas (VA248A11-2)

Entidad financiadora: Junta Castilla y León

Año de inicio: 2011 Año de finalización: 2013

Cuantía: : 30000 €

Función del profesor: Investigador

Título del proyecto o contrato: Diseño de catalizadores para una Química Sostenible: Una aproximación integrada (INTECAT) (Consolider Ingenio 20010-CSD20)

Entidad financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia

Año de inicio: 2006 Año de finalización: 2011

Cuantía: : 4.9e+06 €

Función del profesor: Investigador

Título del proyecto o contrato: Molecules for materials: Molecular systems for liquid crystals, optoelectronics, polarizers, luminescent devices, and metal nanoparticle precursors (CTQ2008-03954/BQU)

Entidad financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia

Año de inicio: 2009 Año de finalización: 2011

Cuantía: 211.000 €

Función del profesor: Investigador

Estancias en Centros extranjeros: Desde octubre de 1989 hasta noviembre de 1990 en Department of Chemistry de la University of Sheffield con el Prof. Peter Maitlis.

Codirector de 4 Tesis doctorales

Publicaciones (tres):

1. Título: : "Highly fluorescent complexes with gold, palladium or platinum linked to perylene through a tetrafluorophenyl group" Dalton Trans., 2013, 42, 6353-6365.

2. Título: : "Highly fluorescent complexes with 3-isocyanoperylene and N-(2,5-di-tert-butylphenyl)-9-isociano-perylene-3,4-dicarboximide" Dalton Trans., 2014, 43, 10885-10897.

3. Título: "Higher fluorescence in platinum(IV) orthometallated complexes of perylene imine compared with their

Desde el año 1990 ha participado de forma continuada en proyectos de investigación nacionales y regionales, en estos momentos se recibe financiación de los siguientes proyectos:

1. Título del proyecto: Agregados nanoestructurados funcionales: Cristales líquidos, sistemas luminiscentes y nanopartículas metálicas (VA248A11-2)

Entidad financiadora: Junta Castilla y León.

Entidades participantes:

Duración, desde: 01/01/2011 hasta: 31/12/2013

Cuantía de la subvención: 30.000 €

Investigador responsable: Dr. Silverio Coco

2. Título del proyecto: Diseño de Catalizadores para una Química Sostenible: Una Aproximación Integrada (INTECAT)

Entidad financiadora: MEC (CSD2006-00003)

Entidades participantes: Universidad de Valladolid y 11 más

Duración, desde: 15/9/2006 hasta: 14/9/2011

Cuantía de la subvención: 346.398,00 €; Datos económicos para el total del proyecto.

Investigador responsable: Pablo Espinet. Investigador coordinador: Miquel Pericás del ICIQ

3. Título del proyecto: Molecules for materials: Molecular systems for liquid crystals, optoelectronics, polarizers, luminescent devices, and metal nanoparticle precursors.

Entidad financiadora: D.G.E.S. (CTQ2008-03954/BQU)

Entidades participantes: Universidad de Valladolid

Duración, desde: 30/12/2008 hasta: 30/12/2011

Cuantía de la subvención: 211.000 €. Investigador responsable: Pablo Espinet

Víctor M. Rayón Rico

Correo electrónico: victormanuel.rayon@qf.uva.es

Licenciado en Química. Universidad de Oviedo. 1994

Doctor en Química. Universidad de Oviedo. 2000

Soy licenciado en Ciencias Químicas por la Universidad de Oviedo (1994) y Doctor en Química por la misma Universidad (2000, premio extraordinario de doctorado). Después de un período de 2 meses como Profesor Asociado y una beca en el Centro de Proceso de Datos de la Universidad de Oviedo (8 meses) obtuve una beca postdoctoral del Ministerio de Educación, Cultura y Deporte con la que me incorporé al grupo de investigación del Profesor Gernot Frenking en la Universidad Philipps de Marburgo (Alemania; 2001-2003). En febrero del año 2004 me incorporé a la Universidad de Valladolid con un contrato Ramón y Cajal. En el año 2009 obtuve una plaza de Profesor Contratado Doctor en la misma Universidad y desde el año 2011 soy Profesor Titular de Universidad.

Mi Tesis Doctoral, centrada en el estudio de las interacciones débiles (no covalentes) por medio de herramientas mecanocuánticas, me permitió obtener una sólida formación teórica en los métodos de la estructura electrónica: métodos ab initio correlacionados, DFT, análisis de la estructura electrónica y del enlace químico (SAPT, NBO, etc.). Me gustaría destacar el hecho de que, sin embargo, mis dos primeros trabajos publicados se centraron en el campo de la astroquímica, en concreto en el estudio de la estructura electrónica y las posibles rutas de formación de compuestos clorocarbonados en el medio interestelar. Por otro lado, la investigación desarrollada durante la estancia postdoctoral en la Universidad Philipps de Marburgo se centró en el estudio de la estructura electrónica y el enlace de especies que contenían metales de transición, de nuevo usando metodologías mecanocuánticas, principalmente DFT. Tras mi incorporación como investigador Ramón y Cajal a la Universidad de Valladolid he participado activamente en las líneas de investigación desarrolladas por el grupo de investigación dirigido por los Profesores Antonio Largo y Carmen Barrientos: química interestelar, química atmosférica y estructura molecular. En concreto, mi investigación se ha centrado principalmente en los estudios de estructura molecular, por un lado, y, por otro, en el análisis cinético de procesos relevantes en química atmosférica e interestelar. Con el fin de profundizar en los métodos de la estructura electrónica realicé en los años 2005, 2006 y 2007 tres estancias en el Instituto Heyrovsky de Química Física perteneciente a la Academia de Ciencias de la República Checa. Estas estancias permitieron completar mi formación en metodologías multirreferenciales, las cuales posteriormente apliqué al estudio de la estructura electrónica de cianuros (XCN) y pequeños clusters de carbono (C<sub>n</sub>X) de interés en la química nuevos materiales y en astroquímica. Por otro lado, una estancia breve en el Departamento de Química y Materiales de La Universidad de L'Aquila (Italia), como parte de una Acción Integrada con el Prof. M. Aschi, me permitió profundizar en el campo de las teorías cinéticas. Este tipo de estudios lo he desarrollado desde entonces aplicándolo a diferentes tipos de procesos, entre ellos algunos de particular interés en la química interestelar (por ejemplo, la reacción entre acetileno y P<sup>+</sup>).

Algunas Publicaciones Relevantes:

Molpeceres, G.; Rayón, V.M; Barrientos, C.; Largo, A. "Molecular structure and bonding in plutonium carbides: a theoretical study of PuC<sub>3</sub>", J. Phys. Chem. A 2016, 120, 2232-2239.

Redondo, P.; Largo, A.; Rayón, V.M.; Molpeceres, G.; Sordo, J.A.; Barrientos, C. "Halogen-abstraction reactions from chloromethane and bromomethane molecules by alkaline-earth monocations", Phys. Chem. Chem. Phys. 2014, 16, 16121-16136.

Barrientos, C.; Rayón, V.M; Largo, A.; Sordo, J.A.; Redondo, P. "Kinetics Studies of the Reactions of Main Fourth-Period Monocations (Ga<sup>+</sup>, Ge<sup>+</sup>, As<sup>+</sup>, and Se<sup>+</sup>) with Methyl Fluoride" J. Phys. Chem. A 2013, 117, 7742.

---

Redondo, P.; Varela-Álvarez A.; Rayón, V.M.; Largo, A.; Sordo, J.A.; Barrientos, C. "Reactivity of First-Row Transition Metal Monocations (Sc<sup>+</sup>, Ti<sup>+</sup>, V<sup>+</sup>, Zn<sup>+</sup>) with Methyl Fluoride: A Computational Study" *J. Phys. Chem. A* 2013, 117, 2932

Zalazar, M.F.; Rayón, V.M.; Largo, A. "Molecular Structure of uranium carbides: isomers of UC<sub>3</sub>" *J. Chem. Phys.* 2013, 138, 114307.

Zalazar, M.F.; Rayón, V.M.; Largo, A. "On the molecular structure of uranium dicarbide: T-shape versus linear isomers" *J. Phys. Chem. A* 2012, 116, 2972.

Cimas, A.; Rayón, V.M.; Largo, A. "Computational Study of the Reaction of P<sup>+</sup> with Acetylene: Does Spin-Crossing Play a Significant Role?" *J. Phys. Chem. A* 2012, 116, 3014.

Barrientos, C.; Redondo, P.; Largo, L.; Rayón, V.M.; Largo, A. "Gas-phase synthesis of precursors of interstellar glycine: a computational study of the reactions of acetic and hydroxylamine and its ionized and protonated derivatives", *Astrophys. J.* 2012, 748, 99(1-7).

Largo, L.; Redondo, P.; Rayón, V.M.; Largo, A.; Barrientos, C.; "The reaction between NH<sub>3</sub><sup>+</sup> and CH<sub>3</sub>COOH: a possible process for the formation of glycine precursors in the interstellar medium", *Astron. & Astrophys.* 2010, 516, A79

Rayón, V.M.; Redondo, P.; Barrientos, C.; Largo, A. "Structure and bonding in third-row main group dicarbides C<sub>2</sub>X(X=K-Br)", *J. Chem. Phys.* 2010, 133, 124306.

Rayón, V.M.; Valdés, H.; Díaz, N.; Suárez, D. "Monoligand Zn(II) complexes: Ab initio benchmark calculations and comparison with density functional theory methodologies" *J. Chem. Theor. Comput.* 2008, 4, 243.

Rayón, V.M.; Redondo, P.; Barrientos, C.; Largo, A. "Structure and bonding in first-row transition-metal dicarbides: are they related to the structure of met-cars?", *Chem. Eur. J.* 2006, 12, 6963-6975.

Frenking, G.; Wichmann, K.; Frohlich, N.; Loschen, C.; Lein, M.; Frunzke, J.; Rayon, V.M. "Towards a rigorously defined quantum chemical analysis of the chemical bond in donor-acceptor complexes" *Coord. Chem. Rev.* 2003, 238, 55.

---

## Idioma en que se imparte

Español

---