Diseño y análisis de experimentos

GUÍA DOCENTE

Curso 2010-2011

Titulación:	Máster en Química Avanzada	Código
Asignatura:	Diseño y análisis de experimentos	Código
Materia:		
Módulo:	Optativo	

Semestre:	2º				
Créditos ECTS:	3	Horas presenciales:	30	Horas de trabajo autónomo estimadas:	45

Idiomas en los que se imparte:	Español
Idiomas del material de lectura o audiovisual:	Español, inglés y francés

Departamentos responsables de la docencia:

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA					Código
Dirección:	C/ Madre de Dios 51			Código postal:	26006
Teléfono:	941 299620	Fax:	941 299621	Correo electrónico:	dpto.quimicas@unirioja.es

Profesores

Profesor responsable de la asignatura:	José María González Sáiz		
Teléfono:	941 299634	Correo electrónico:	josemaria.gonzalez@unirioja.es
Despacho:	1118	Edificio:	CCT
Horario de tutorías:	Lunes, martes y miércoles de 11:00 a 13:00.		

Nombre profesor:	Consuelo Pizarro Millán		
Teléfono:	941 299626	Correo electrónico:	consuelo.pizarro@unirioja.es
Despacho:	1109	Edificio:	CCT
Horario de tutorías:	Martes y miércoles de 9:30 a 12:30.		

Nombre profesor:	Isabel Esteban Díez

Teléfono:	941 29935	Correo electrónico:	isabel.esteban@unirioja.es
Despacho:	1119	Edificio:	CCT
Horario de tutorías:	Lunes, martes y miércoles de 10:30 a 12:30		

Descripción de contenidos:

- Factores, espacio experimental, los modelos como herramientas, etc.
- Diseños factoriales a dos niveles
- Diseños factoriales fraccionales
- Diseños para la sección de variables
- Maxima pendiente en ascenso.
- Simplex
- Método de superficies de respuestas
- Algoritmos de intercambio
- Diseño de mezclas

Requisitos previos:

Se aconseja conocer fundamentos de Estadística y Quimiometría

PROGRAMA GENERAL

Contexto:

Esta asignatura proporciona al alumno conocimientos y habilidades que le permitirán ser capaz desarrollar una metodología basada en herramientas matemáticas y estadísticas cuyo objetivo es ayudarle en la selección de la estrategia experimental óptima, permitiéndole, además, evaluar los resultados experimentales obtenidos y garantizando la máxima fiabilidad en las conclusiones finales que se obtengan. Estos conocimientos y habilidades constituyen un punto de partida para la realización del trabajo fin de master y en su caso la tesis doctoral, particularmente en cualquiera de las áreas de la Química.

Competencias:

- Comprender la necesidad de aplicar el Diseño estadístico de Experimentos en la planificación de la experimentación.
- Demostrar conocimiento y comprensión de la metodología del diseño de experimentos y las distintas etapas implicadas en su aplicación práctica.
- Conocer los principales tipos de diseños experimentales clásicos, sus propiedades, objetivos y adecuación en función del problema
- Familiarizarse con la aplicación (a nivel de usuario) de herramientas estadísticas de cálculo al diseño de experimentos.
- Comprender la importancia y necesidad de “diseñar calidad” en lugar de limitarse a verificarla.

Resultados del aprendizaje:

- Dominar las herramientas básicas de análisis estadístico para poder obtener conclusiones válidas.
- Adquirir criterios y herramientas de diseño experimental para planificar la experimentación eficazmente según los objetivos buscados.
- Enfrentar la comprensión de un problema analítico y definir claramente su objetivo.
- Identificar los factores que potencialmente podrían influir en la función objetivo y el dominio experimental de interés.
- Planificar la experimentación, seleccionando el tipo de diseño más adecuado en cada caso.
- Ser capaz de ejecutar un plan de experimentación previamente optimizado, y de interpretar los resultados una vez llevada a cabo la experimentación.
- Desarrollar el razonamiento crítico respecto a la planificación y valoración de resultados como medio para reforzar la confianza del investigador, su capacidad de reacción y de argumentación.
- Desarrollar la capacidad de análisis, de síntesis, de organización y de adaptación a nuevas situaciones y condiciones de operación.

Temario:

Capítulo I: Introducción al Análisis de Datos

Tema 1 INTRODUCCIÓN.

Conceptos generales. La precisión y la exactitud como criterio. Análisis de la varianza de un factor. Error de la prueba analítica. Error del muestreo químico. Error entre lotes. Diseño jerarquizado. Análisis de la varianza con interacción

Capítulo II: Diseño de Experimentos.

Tema 2 INTRODUCCIÓN (FACTORES. ESPACIO EXPERIMENTAL).

Conceptos generales. Variables independientes, espacio experimental, respuestas. Selección de variables importantes. Optimización. Método "una variable cada vez".

Tema 3 MODELOS COMO HERRAMIENTAS

Modelos cuantitativos. Expresiones de la variable respuesta. Aspectos iniciales en el modelado de datos experimentales. Modelado. Significación de los parámetros estimados del modelo.

Tema 4 DISEÑOS FACTORIALES A DOS NIVELES.

Introducción, planteamiento del problema, aleatorización. Diseños factoriales, análisis, interpretación geométrica, cálculos de los efectos de los factores. Generalización del número de factores.

Tema 5 DISEÑOS FACTORIALES FRACCIONALES.

Introducción. Construcción de un diseño fraccional. Pérdida de información. Separación de efectos confundidos. Experimentación bloques.

Tema 6 OTROS DISEÑOS PARA LA SECCIÓN DE VARIABLES.

Diseños Plackett-Burman.

Capítulo III: Optimización.

Tema 7 MAXIMA PENDIENTE EN ASCENSO.

Principios, dirección. Ventajas y desventajas.

Tema 8 SIMPLEX.

El simplex como técnica secuencial. Principios, variables. Simpex modificado.

Tema 9 MÉTODO DE SUPERFICIES DE RESPUESTAS.

Estrategia paso a paso. Validación del modelo. Condiciones óptimas. Visualización mediante proyecciones. Diseños para modelos cuadráticos. Optimización para más de una variable respuesta.

Tema 10 ALGORITMOS GENÉTICOS

Introducción. Propiedades fundamentales. Ejemplos.

Tema 11 ALGORITMOS DE INTERCAMBIO.
Introducción. Propiedades fundamentales. Ejemplos.

Capítulo IV: Otros diseños.

Tema 12. DISEÑO DE MEZCLAS.
Diseño de mezclas sin restricciones. Diseño de mezclas con restricciones. Modelos alternativos. Problemas que involucran diseños de mezclas.

Bibliografía:

Libros básicos:
- WALPOLE Y MYERS. "Probabilidad y estadística". 4ª Ed.. Mc Graw-Hill. 1992
- J. MILLER Y J. MILLER. "Estadística y Quimiometría para Química Analítica". Prentice Hall. 2002.
- M. MELOUN, J. MILITKY & M. FORINA. "Chemometrics for Analitical Chemistry". Ellis Horwood. 1992.

Se trata de tres libros de estadística y quimiometría de carácter general, enfocados fundamentalmente hacia una estadística aplicada a la química. Estos libros sentarán la base estadística necesaria a lo largo de los primeros temas de la asignatura.

Monografías especializadas:
- G.A. Lewis, D. Mathieu, R. Phan-Tan-Luu. "Pharmaceutical Experimental Design". Marcel Dekker, Inc, New York, 1999.
- Nemrod-W version 2001 by Didier Mathieu, Jean Nony and Roger Phan-Tan-Luu, LPRAI, Marseille, France. User's manual.
- G.E.P. BOX, W.G. HUNTER y J.S. HUNTER. "Estadística para Investigadores. Introducción al diseño de experimentos, Análisis de datos y construcción de modelos". Reverté. 1989.
- G.E.P. BOX, N.R. DRAPER. "Empirical model-building and response surfaces". John Wiley & Sons. 1987.
- R. CARLSON. "Desing and Optimization in Organic Synthesis". Elsevier. 1992.
- C.M CUADRAS. "Métodos de Análisis Multivariante". 2ª Ed. PPU, Barcelona, 1991.
- D.L. MASSART, B.G.M. VANDEGISTE, S.N. DEMING. "Chemometrics: a textbook". Elsevier. 1988.

Estos siete libro que se recomiendan son específicos sobre los diseño de experimentos y abarcan tanto los aspectos teóricos como prácticos. Incluyen una colección importante de ejemplos prácticos en unos de los campos de aplicación más importantes para un químicos como son la síntesis química y farmacéutica

Otro material bibliográfico (disponible en la página web de la biblioteca de la UR):
- SCOPUS
- Revistas científicas de Quimiometría

Metodología

Modalidades organizativas:	Métodos de enseñanza:
- MO1: Clases teóricas - MO2: Seminarios y talleres - MO3: Clases prácticas - MO5: Tutorías - MO6: Estudio y trabajo en grupo - MO7: Estudio y trabajo autónomo del alumno	- ME1: Lección magistral - ME3: Resolución de ejercicios y problemas

Organización

Actividades presenciales:	Horas
- Clases teóricas	13
- Clases prácticas de aula	12
- Pruebas presenciales de evaluación	2
- Otras actividades	3
Total horas presenciales	30

Actividades no presenciales (trabajo autónomo):	Horas estimadas
- Estudio autónomo individual o en grupo	20
- Resolución individual de ejercicios, cuestiones u otros trabajos, actividades en biblioteca o similar	10
- Preparación de las prácticas y elaboración de cuaderno de prácticas	5
- Preparación en grupo de trabajos, presentaciones (orales, debates,...), actividades en biblioteca o similar	10
Total horas estimadas de trabajo autónomo	45
Total horas	75

Evaluación

Sistemas de evaluación:	% sobre total	Recuperable/ No Recuperable
- SE1: Pruebas escritas	30	Recuperable
- SE3: Trabajos y proyectos	15	Recuperable
- SE4: Informes/memorias de prácticas	5	Recuperable
- SE5: Pruebas de ejecución de tareas reales y/o simuladas	5	Recuperable.
- SE6: Sistemas de Autoevaluación	20	No Recuper.
- SE7: Escalas de actitudes	5	No Recuper.
- SE9: Portafolio	20	Recuperable

Criterios críticos para superar la asignatura:

- Calificación media en las pruebas escritas y autoevaluaciones ≥ 5(sobre 10)
- Presentación obligatoria del portafolios y de los trabajos y proyectos
- Asistencia a las sesiones presenciales ≥ 70%

Profesor responsable de la asignatura	Fdo.: José María González Sáiz En Logroño a 06 de mayo de 2010

Fotoquímica Orgánica

GUÍA DOCENTE

Curso 2010-2011

Titulació	Máster en Química Avanzada	Código

Asignatura:	Fotoquímica Orgánica	Código
Materia:		
Módulo:		

Semestre:	1º

Créditos ECTS:	3	Horas presenciales:	35	Horas de trabajo autónomo estimadas:	40

Idiomas en los que se imparte:	Español
Idiomas del material de lectura o audiovisual:	Español e Inglés

Departamentos responsables de la docencia:

Departamento de Química					Código
Dirección:	Madre de Dios, 51. Logroño (La Rioja)			Código postal:	26006
Teléfono:	941 299 620	Fax:	941 299 621	Correo electrónico:	dpto.quimicas@unirioja.es
					Código

Profesores

Profesor responsable de la asignatura:	Pedro José Campos García		
Teléfono:	941 299650	Correo electrónico:	pedro.campos@unirioja.es
Despacho:	D-1214	Edificio:	CCT
Horario de tutorías:	Lunes, Martes, Miércoles: 11-13		

Nombre profesor:	Miguel Angel Rodríguez Barranco		
Teléfono:	941 299651	Correo electrónico:	miguelangel.rodriguez@unirioja.es

Despacho:	1215	Edificio:	CCT
Horario de tutorías:	Lunes, miércoles y viernes de 9:30 a 11:30h		

Nombre profesor:	Diego Sampedro Ruiz		
Teléfono:	941 299647	Correo electrónico:	diego.sampedro@unirioja.es
Despacho:	1211	Edificio:	CCT
Horario de tutorías:	Lunes, martes y miércoles de 17 a 19h		

Descripción de contenidos:

1.- CONCEPTOS GENERALES DE FOTOQUÍMICA. Introducción e importancia de la fotoquímica. Algunas consideraciones históricas sobre la Fotoquímica Orgánica. Características diferentes de las reacciones fotoquímicas. Estados electrónicamente excitados. Distribución energética en la molécula excitada; diagrama de Jablonski. Cinéticas fotoquímicas; rendimiento cuántico. Desactivación y sensibilización. Transiciones electrónicas. Otros métodos de producción de estados excitados: descargas eléctricas, radiaciones ionizantes, activación térmica, activación química.
2.- TÉCNICAS EXPERIMENTALES. La investigación fotoquímica. Técnicas preparativas; fuentes de luz, filtros, reactores, disolventes y gases. Determinación de rendimientos cuánticos; actinómetros químicos. Técnicas no preparativas; Fotólisis de destello. Espectros de luminiscencia; rendimiento cuántico de emisión. Tiempo de vida de fluorescencia (luminiscencia). Láseres; introducción. Amplificación láser. Características del láser. Tipos de láseres. Aplicaciones químicas. Femtoquímica.
3.- EJEMPLOS DE ESTUDIOS MECANÍSTICOS EN FOTOQUÍMICA.
A) DIMERIZACIÓN DEL ANTRACENO. Introducción. Aspectos estructurales. Aplicación de modelos teóricos. Mecanismo de dimerización de antraceno; rendimientos cuánticos; procesos c.q., variaciones cinéticas en función de la estructura. Antraceno en el estado triplete.
B) CICLOADICIONES FOTOQUÍMICAS DE IMINOCARBENOS. Introducción. Cicloadiciones con alquenos. Aspectos fotoquímicos y mecanísticos. Reacciones con alquinos. Estudio computacional y propuesta mecanística.
4.- FOTOQUÍMICA DE LOS DOBLES ENLACES C=X. El enlace C=C. Generalidades e isomerizaciones. Reacciones de cicloadición y de cicloreversión. Transposición de di-π-metano. El enlace C=O, excitación electrónica. Reacciones de fragmentación. Otros procesos fotoquímicos: descarbonilación, cicloadición, fotorreducción, funcionalización remota. Fotoquímica del enlace C=N. Isomerización; fotoquímica de la visión. Acoplamiento y reducción. Otras reacciones: cicloadiciones, transposiciones, fragmentaciones.
5.- TRANSFERENCIA ELECTRONICA EN FOTOQUIMICA. Introducción; reacciones PET. Sensibilizadores electrónicamente deficientes. Sensibilizadores electrónicamente ricos. Ejemplos de reacciones de transferencia electrónica en fotoquímica. Reacciones de compuestos aromáticos. Procesos PET con reactivos inorgánicos. Importancia de las reacciones PET.
6.- APLICACIONES SINTETICAS. Ciclaciones y cicloreversiones de alquenos, aromáticos y acetilenos. Fotoquímica de carbonilos insaturados. Reacciones de fotooxidación. Isomerizaciones de heterociclos. Otras reacciones de heterociclos. Reacciones intramoleculares de nitroaromáticos. Síntesis fotoquímica de compuestos quirales. Grupos protectores fotoeliminables.
7.- FOTOQUÍMICA TEÓRICA; LUZ Y MATERIA. La interacción de las moléculas con la radiación. Momento dipolar de transición. Fuerza del oscilador e intensidades de transición. Reglas de selección.
8. MÁQUINAS MOLECULARES ACTIVADAS POR LA LUZ. Dispositivos moleculares. Interruptores y motores. Roraxanos y catananos. Puertas lógicas.

Requisitos previos:

No tiene requisitos previos, pero se aconseja conocer los fundamentos de Química Física, Química Orgánica y Espectroscopia

PROGRAMA GENERAL

Contexto:

La Fotoquímica es la ciencia que estudia el comportamiento de la materia cuando absorbe fotones. Los procesos fotoquímicos y fotofísicos de las moléculas orgánicas tienen gran importancia en multitud de campos, así tienen relación con la fotosíntesis, el fenómeno de la visión o el aprovechamiento de la energía solar, entre otros. En la licenciatura y el grado en Química tiene muy poca presencia la Fotoquímica y sólo se estudian unas generalidades en Química Física Avanzada. Parece pues interesante programar una asignatura de Fotoquímica en un Máster de investigación que prepara a los alumnos para el Doctorado y en especial debido a la presencia de un grupo de investigación en el Departamento de Química que trabaja en Fotoquímica Orgánica.

Esta asignatura rellena la laguna de los conocimientos de Fotoquímica teórica y experimental y prepara a los estudiantes para poder comenzar las investigaciones en el campo de la Fotoquímica Orgánica.

Se han programado contenidos de generales de Fotoquímica, un repaso a las técnicas experimentales usadas, tanto en la Fotoquímica preparativa (Síntesis Fotoquímica) como en la Fotoquímica mecanística y Fotofísica y un estudio de las investigaciones de mecanismos fotoquímicos por diversas metodologías. Se hace un repaso del comportamiento fotoquímico de las principales funciones orgánicas, de las aplicaciones de la Fotoquímica y se termina con una introducción a la Fotoquímica teórica y con un estudio de nanodispositivos activados por la luz

Competencias:

- Conocer los fundamentos de la interacción radiación-materia desde un punto de vista fotofísico y fotoquímico
- Conocer las técnicas experimentales empleadas en Fotofísica y Fotoquímica
- Conocer los métodos de estudio mecanístico en Fotoquímica, el comportamiento frente a la luz de las principales funcionalidades orgánicas y las aplicaciones de la Fotoquímica para la preparación de moléculas orgánicas.
- Conocer los principios y aplicaciones de la Fotoquímica Teórica.

Resultados del aprendizaje:

- El alumno comprende y conoce lo que le ocurre a las moléculas al absorber fotones
- El alumno es capaz de diseñar experimentalmente procesos fotoquímicos y realizar medidas fotofísicas y fotoquímicas (Fotólisis de destello láser, luminiscencia, rendimientos cuánticos, etc.)
- El alumno es capaz de proponer mecanismos razonables para procesos fotoquímicos convencionales
- El alumno es capaz comprender la importancia de los cálculos fotoquímicos y conocer los principios de los nanodispositivos activados por la luz.

Temario:

1.- CONCEPTOS GENERALES DE FOTOQUÍMICA.
2.- TÉCNICAS EXPERIMENTALES. Fotoquímica preparativa. Fotoquímica mecanística y Fotofísica.
3.- EJEMPLOS DE ESTUDIOS MECANÍSTICOS EN FOTOQUÍMICA. A) DIMERIZACIÓN DEL

ANTRACENO. B) CICLOADICIONES FOTOQUÍMICAS DE IMINOCARBENOS.
4.- FOTOQUÍMICA DE LOS DOBLES ENLACES C=X. El enlace C=C. El enlace C=O. Fotoquímica del enlace C=N.
5.- TRANSFERENCIA ELECTRONICA EN FOTOQUIMICA.
6.- APLICACIONES SINTETICAS.
7.- FOTOQUÍMICA TEÓRICA; LUZ Y MATERIA.
8.- MÁQUINAS MOLECULARES ACTIVADAS POR LA LUZ

Bibliografía:

Textos Fotoquímicos:

1. D.O. Cowan, R.L. Drisco, "Elements of Organic Photochemistry", Plenum: N.Y., 1976.
2. J.D. Coyle, "Introduction to Organic Photochemistry", Wiley: Chichester (UK) 1986.
3. A. Gilbert, J. Baggott, "Essentials of Molecular Photochemistry", Blackwell: Oxford, 1991.
4. W. Horspool, D. Armesto, "Organic Photochemistry. A Comprehensive Treatment", E. Horwood: Chichester, 1992.
5. J. Kagan, "Organic Photochemistry. Principles and Applications", Academic Press: London, 1993.
6. P. Klan, J. Wirz,"Photochemistry of Organic Compounds", Wiley: Chichester, UK, 2009
7. M. Klessinger, J. Michl, "Excited States and Photochemistry of Organic Molecules", VCH: New York, 1995.
8. J. Kopecky, "Organic Photochemistry. A visual Approach", VCH: N.Y. 1992.
9. N.J. Turro, V. Ramamurthy, J.C. Scaiano "Principles of Molecular Photochemistry. An Introduction", Univ. Science Books, Sausalito, CA (USA), 2009.
10. R.P. Wayne, "Principles and Applications of Photochemistry", Oxford U.P.: Oxford, 1988.

Estas 10 obras son los textos más importantes de Fotoquímica. Algunos son clásicos antiguos, pero muy válidos y dos de los más modernos textos publicados, la nueva edición del clásico de Turro (junto con Ramamurthy y Scaiano) y la obra de Klan y Wirz.

Monografías, recopilaciones y obras de revisiones:

11. J.D. Coyle, (ed.), "Photochemistry in Organic Synthesis", Royal Soc. Chem.: Cambridge (UK), 1989.
12. W. Horspool, P.-S. Song, (eds.) "CRC Handbook of Organic Photochemistry and Photobiology", CRC Press: Boca Raton (USA), 1994. 2º Edition, W. Horspool, F. Lenci, (eds.), 2004. Enciclopedia fotoquímica formada por una colección de artículos de especialistas. Dos ediciones complementarias.
13. "Photochemistry, Specialist Periodical Reports", vol 1-36, The Royal Society of Chemistry: London - Cambridge, 1970-2004. Resúmen de la bibliografía fotoquímica desde 1970. Se publica un volumen al año aproximadamente.
14. V. Ramamurthy, (ed), "Molecular and Supramolecular Photochemistry, vol 1-14, Marcel Dekker: New York, 1997-2006. Colección de monografías modernas sobre temas fotoquímicos que se publican regularmente editados por el profesor Ramamurthy.
15. K.C. Smith (ed.), "The Science of Photobiology", 2nd edit., Plenum: N.Y., 1989.

Obras de Fotoquímica Teórica y Computacional:

16. W. Domcke, D.R. Yarkony, H. Köppel, "Conical intersections: Electronic Structure, Dynamics & Spectroscopy", World Scientific: Singapore, 2004.
17. M. Olivucci (ed.), "Computational Photochemistry", Elsevier: Amsterdam, 2005.
18. A. Kutateladze (ed.), "Computational Methods in Photochemistry, Taylor & Francis Press: Boca Raton (USA), 2005.

Estas tres obras forman la base mínima de la Fotoquímica Computacional y están escritas por los principales expertos en el tema.

Obras sobre máquinas moleculares

19. V. Balzani, A. Credi, M. Venturi "Molecular Devices and Machines", Wiley-WCH: Weinheim, 2003.
20. T.R. Kelly (ed.), "Molecular Machines", Top. Curr. Chem. 262, Springer: Berlin, 2005.

Algunas direcciones de internet sobre Fotoquímica:

- http://www.unirioja.es/VIIFotoquimica/. Página del VII Congreso de Fotoquímica, Logroño, 22-24/06/2005
- http://www.kongresuak.ehu.es/p275-content/es/contenidos/informacion/ix_congreso_fotoquimica/es_inf/fotoquimica.html. Página del IX Congreso de Fotoquímica, Bilbao, sept. 2009
- http://www.icp09-toledo.com/ Página de la XXIV International Conference on Photochemisty, Toledo, 19-24 julio de 2009.
- http://web.unife.it/convegni/iupac-photochem-2010/. XIII IUPAC Symposium on Photochemistry, Ferrara (Italia), 11-16 de julio de 2010.
- http://www.chemres.hu/pchem/. Colección de bibliografía reciente.
- http://www.columbia.edu/cu/chemistry/fac-bios/turro/faculty.html. Página web de N.J. Turro.
- http://www.rsc.org/Publishing/Journals/pp/index.asp. Página de la revista *Photochemical & Photobiological Sciences*, editada por la RSC.
- http://ccmaol1.chim.unisi.it/. Página del grupo de Massimo Olivucci.
- http://www.photochemistry.eu/. Página de la EPA, European Photochemistry Association

Se indican las webs de algunos de los congresos que ha participado el grupo de investigación que es responsable de esta asignatura, así como las páginas de asociaciones fotoquímicas (EPA), revistas fotoquímicas (PPS) y fotoquímicos conocidos.

Metodología

Modalidades organizativas:	Métodos de enseñanza:
- MO1: Clases teóricas - MO2: Seminarios y talleres - MO3: Clases prácticas - MO5: Tutorías - MO7: Estudio y trabajo autónomo del alumno	- ME1: Lección magistral - ME3: Resolución de ejercicios y problemas

Organización

Actividades presenciales:	Horas
- Clases teóricas	22
- Clases prácticas de aula	5
- Pruebas presenciales de evaluación	3
- Otras actividades	5
Total horas presenciales	**35**

Actividades no presenciales (trabajo autónomo):	Horas estimadas
- Estudio autónomo individual o en grupo	20
- Resolución individual de ejercicios, cuestiones u otros trabajos, actividades en biblioteca o similar	20
- Preparación en grupo de trabajos, presentaciones (orales, debates,...), actividades en biblioteca o similar	0

Total horas estimadas de trabajo autónomo	40
Total horas	75

Evaluación

Sistemas de evaluación:	% sobre total	Recuperable/ No Recuperable
SE3: Trabajos y proyectos	50	No recuperable
SE6: Sistemas de Autoevaluación	50	No recuperable

Criterios críticos para superar la asignatura:

Profesor responsable de la asignatura	Fdo.: Pedro J. Campos García En Logroño a 06 de mayo de 2010

Instrumentación química: análisis, adquisición y control de las señales en la experimentación química

GUÍA DOCENTE

Curso 2010-2011

Titulació	Master en Química Avanzada	Código

Asignatura:	Instrumentación química: análisis, adquisición y control de las señales en la experimentación química
Materia:	
Módulo:	

Semestre:	1º

Créditos ECTS:	3	Horas presenciales:	33	Horas de trabajo autónomo estimadas:	42

Idiomas en los que se imparte:	Español
Idiomas del material de lectura o audiovisual:	Español e Ingles

Departamentos responsables de la docencia:

Química				Código	
Dirección:	C/ Madre de Dios, 51 Logroño (La Rioja)			Código postal:	26006
Teléfono:	+34 941 299 620	Fax:	+34 941 299 621	Correo electrónico:	dpto.quimicas@unirioja.es

Profesores

Profesor responsable de la asignatura:	Francisco Javier Guallar Otazua		
Teléfono:	+34 941 299 659	Correo electrónico:	javier.guallar@unirioja.es
Despacho:	D-1225	Edificio:	CCT
Horario de tutorías:	Lunes de 10h a 12h, Martes de 10h a 12h y Miércoles de 16h30 a 18h30		

Descripción de contenidos:

Fundamentos:

- Del transductor al fichero de datos. Conversión analógica digital y digital analógica. Entrada y salida de señales digitales. Algunas características eléctricas de los sensores (temperatura, pH, fotodiodo, fotomultiplicador, presión . . .)

Instrumentación:

- Ordenador (PCI, USB, GPIB, Serie..), Tarjeta de adquisición de datos Amplificadores. Osciloscopio digital en el muestreo de señales rápidas.

Programación:

- Estructura de un programa de LabVIEW. Diagrama y panel. Subprogramas Tipos básicos de datos. Elementos básicos de programación. Programación de funciones matemáticas. Análisis de resultados. (Gráficos, estadísticos, ajustes a funciones..). Manejo de tarjetas de adquisición de datos. Programación GPIB de equipos para la adquisición y control de equipos con las herramientas de LabVIEW. Lectura y almacenamientos de ficheros.

Requisitos previos:

No hay ningún requisito previo

PROGRAMA GENERAL

Contexto:

Hoy en día muchas de las medidas que se realizan en un laboratorio de investigación terminan en un sistema de adquisición de datos y en un ordenador. Pueden darse dos situaciones. Por un lado, el equipo de medida es compacto, es decir, que salga de la fábrica completo y con todo el programa preparado para realizar un tipo de medida. En cambio, en otras ocasiones es el propio investigador quien ha de adaptar diferentes equipos para conseguir una determinada medida. En este caso se requiere el diseño propio de un programa que permita el control conjunto de ese equipamiento, así como la adquisición final de los datos de interés.

Una gran parte de los equipos disponen de métodos de programación que permiten al usuario automatizar todo el proceso de adquisición. Ello puede hacerse mediante lenguajes como C++, BASIC, PASCAL, etc.; sin embargo su complejidad se escapa a la duración y a los objetivos de estos cursos de doctorado. Otra forma de programar es mediante lenguajes que usan un interfaz gráfico de programación, cuyo desarrollo actual permite realizar todas las funciones de adquisición y análisis de señales con unos conocimientos básicos de su manejo. Hoy en día existen varios programas que ofrecen esta posibilidad; el más extendido y que trataremos en este curso es el LabVIEW de National Instruments. De hecho, la mayoría de los fabricantes de equipos de adquisición y análisis suelen ofrecer librerías de programas y subrutinas que pueden ser directamente ejecutadas desde programas en lenguaje LabVIEW.

En consecuencia, este curso pretende introducir al estudiante en el conocimiento de los procesos de control, adquisición y análisis de señales en experimentación química, así como de su automatización mediante el lenguaje de programación LabVIEW. Evidentemente, dada la duración limitada del curso, el objetivo no es el de hacer que el alumno se convierta en un experto en adquisición de datos, sino que sepa integrar procesos elementales en un sistema de adquisición y conozca alguna de las metodologías que le permitan plantear y buscar soluciones en situaciones más complejas. Además, en el caso de usuarios de equipos compactos o preparados por otros, se pretende que conozcan las limitaciones de las herramientas que utilizan, así como las posibilidades de metodologías alternativas de automatización.

Competencias:

- Conocer las características básicas de señales eléctricas y de los conversores.
- Programar operaciones de análisis numérico de los datos adquiridos en el ordenador.
- Conocer las diversas herramientas que permiten controlar instrumentos y representar los datos experimentales en la pantalla del ordenador.
- Conocer los procesos de control, adquisición y análisis de señales en experimentación química, así como de su automatización mediante el lenguaje de programación LabVIEW.

Resultados del aprendizaje:

- Identificar las características y limitaciones de instalaciones modulares sencillas y de los componentes de equipos compactos.
- Saber analizar datos experimentales.
- Ser capaz de desarrollar programas de control y representar mediante gráficos los resultados numéricos y experimentales.
- Que sepa integrar procesos elementales en un sistema de adquisición y conozca alguna de las metodologías que le permitan plantear y buscar soluciones en situaciones más complejas

Temario:

- Fundamentos adquisición de señales y control.
  - Conversión analógica digital y digital analógica.
  - Entrada y salida de señales digitales.
  - Algunas características eléctricas de los amplificadores.
  - Ordenador (PCI, USB, GPIB, ..), Tarjeta de adquisición de datos.
  - Osciloscopio digital en el muestreo de señales rápidas.
- Programación con LabVIEW.
  - Diagrama y panel. Subprogramas
  - Tipos básicos de datos.
  - Elementos básicos de programación.
  - Programación de funciones matemáticas.
  - Análisis de resultados. (Gráficos, estadísticos, ajustes a funciones..).
  - Manejo de tarjetas de adquisición de datos.
  - Programación GPIB de equipos para la adquisición y control de equipos con las herramientas de LabVIEW.
  - Lectura y almacenamientos de ficheros.

Bibliografía:

- Antonio Mánuel Lázaro ; Joaquín del Río Fernández; *LabVEW 7.1 Programación Gráfica para el Control de instrumentación*. Thomson 2004.
  - Este es un libro básico sobre programación en LabVIEW en donde se abordan los recursos mas fundamentales, consiguiendo dar una visión global de lo que es una programación de adquisición de datos y control de instrumentos. El libro está dividido en dos bloques uno de programación y en el otro se dan algunos recursos para controlar instrumentos o adquirir datos.
- Jeffrey Travis; Jim Kring; *LabVIEW for Everyone: Grafical Programming Made Easy and Fun (3rd Ediction)*; Prentice Hall 2005.
  - Es un manual sobre el lenguaje de programación gráfica de LabVIEW y está dirigido a lectores con conocimientos básicos de informática. Describe las estructuras básicas así como los tipos de variables que se pueden manejar. En otros capítulos se muestran como diseñar aplicaciones de I/O (Entrada/Salida de datos del ordenador) y como controlar instrumentos. También se dedican varios capítulos a temas mas avanzados de programación.
- Neil Storey; *Electrónica de los sistemas a los componentes*. Addison-Wesley Iberoamericana, 1995.
  - En este libro se da una visión global de la relación que hay entre los componentes electrónicos y sus características fundamentales. No es un libro avanzado y su nivel es adecuado para aquellos que no son especialistas en ingeniería electrónica.

Metodología

Modalidades organizativas:	Métodos de enseñanza:
- MO1: Clases teóricas - MO3: Clases prácticas - MO5: Tutorías - MO6: Estudio y trabajo en grupo - MO7: Estudio y trabajo autónomo del alumno	- ME1: Lección magistral - ME3: Resolución de ejercicios y problemas

Organización

Actividades presenciales:	Horas
- Clases teóricas y practicas en laboratorio	30
- Tutorías	3
Total horas presenciales	**33**

Actividades no presenciales (trabajo autónomo):	Horas estimadas
- Estudio autónomo individual o en grupo	25
- Resolución individual de ejercicios y cuestiones.	5
- Preparación en grupo de trabajos	12
Total horas estimadas de trabajo autónomo	42
Total horas	75

Evaluación

Sistemas de evaluación:	% sobre total	Recuperable/ No Recuperable
Asistencia a clases, participación, resolución de los ejercicios propuestos y autoevaluaciones	60	Solo 50%
Trabajo propuesto	40	Si

Criterios críticos para superar la asignatura:
- La asistencia y participación en las clases teóricas y prácticas de laboratorio. - La claridad en la realización del trabajo.