



GUÍA DOCENTE 2013-2014

Procesos en disolución: cinética y termodinámica de reacciones complejas.

1. Denominación de la asignatura:

Procesos en disolución: cinética y termodinámica de reacciones complejas.

Titulación

Máster en Química Avanzada

Código

7466

2. Materia o módulo a la que pertenece la asignatura:

Módulo General

3. Departamento(s) responsable(s) de la asignatura:

Química

4.a Profesor que imparte la docencia (Si fuese impartida por mas de uno/a incluir todos/as) :

Francisco Javier Arnáiz García, José María Leal Villalba, Begoña García Ruiz, Saturnino Ibeas Cortés, Rafael Alcalde García



4.b Coordinador de la asignatura

Saturnino Ibeas Cortés

5. Curso y semestre en el que se imparte la asignatura:

2 semestre

6. Tipo de la asignatura: (Básica, obligatoria u optativa)

Optativa

7. Requisitos de formación previos para cursar la asignatura:

Se recomiendan conocimientos de química, física y matemáticas a nivel de grado.

8. Número de créditos ECTS de la asignatura:

5.0

9. Competencias que debe adquirir el alumno/a al cursar la asignatura

COMPETENCIAS BÁSICAS Y GENERALES

BÁSICAS

CB6.- Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación

CB7.- Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio

CB8.- Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios

CB9.- Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un



modo claro y sin ambigüedades

CB10.- Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.

GENERALES

CG3.- Tener un alto grado de sensibilización y compromiso activo con temas socioeconómicos y con temas vinculados con el medio ambiente.

CG5.- Tener habilidades en las relaciones interpersonales, demostrando iniciativa, liderazgo y motivación por la calidad, de modo que pueda desarrollar trabajos en equipo

CG6.- Poseer la capacidad de gestionar, evaluar, interpretar, sintetizar y transmitir adecuadamente la información relativa al ámbito de estudio

COMPETENCIAS ESPECÍFICAS

CE1- Haber adquirido conocimientos avanzados de Química demostrando, en un contexto altamente especializado, una comprensión detallada y fundamentada de los aspectos teóricos y prácticos y de la metodología de trabajo en Química.

CE2.- Poseer la capacidad de llevar a cabo procedimientos estándares de laboratorio analíticos, sintéticos y de caracterización de compuestos, manipulando con seguridad reactivos e instrumentación química, teniendo en cuenta riesgos en el uso de las sustancias químicas y los procedimientos de laboratorio.

CE4.- Ser capaces de predecir y controlar la evolución de situaciones complejas en Química mediante el desarrollo de nuevas e innovadoras metodologías de trabajo.

CE5.- Tener la capacidad para proyectar y optimizar experimentos, disminuyendo costes y tiempo, manteniendo la calidad de la información, el respeto al medio ambiente y a las normativas de calidad y seguridad.

CE8.- Saber aplicar sus conocimientos de los procesos químicos tanto en las actividades industriales, como en el laboratorio a problemas nuevos de carácter multidisciplinar.



10. Programa de la asignatura

10.1- Objetivos docentes
Generales: - Adquirir y aplicar los conocimientos y métodos teóricos para caracterizar reacciones complejas. - Conocer distintos tipos de técnicas instrumentales y sus límites de aplicación. - Tomar contacto con la investigación de vanguardia en el campo de reacciones en disolución. Desarrollar en el estudiante habilidades para abordar la resolución de problemas científicos relacionados con la investigación estructural y la catálisis homogénea. Específicos: - Conocer la estructura de proteínas y ácidos nucleicos. - Entender los mecanismos de reacción de proteínas y ácidos nucleicos con distintos tipos de ligandos. - Manejar algunas técnicas instrumentales empleadas en la determinación de propiedades estructurales. - Aprender los métodos teóricos y experimentales relacionados con medidas de propiedades termofísicas. - Estudiar las ventajas y limitaciones de la catálisis homogénea. - Estudiar diferentes procesos catalíticos.
10.2- Unidades docentes (Bloques de contenidos)
Unidad 1 Conformación de macromoléculas biológicas: estructura de proteínas y de ácidos nucleicos. Unidad 2 Mecanismos de las reacciones de complejación con metales de transición. Unidad 3 Mecanismos de las reacciones de intercalación ADN-Ligando y Proteína-Ligando. Técnicas experimentales para la elucidación de los mecanismos de reacción. Unidad 4 Funciones de exceso expresadas en forma polinómica. Caracterización termodinámica de mezclas simétricas, asimétricas, atómicas y regulares. Funciones de exceso y miscibilidad de la mezcla. Modelos teóricos de disoluciones: van Laar, Hildebrand, Wohl.



Unidad 5

Aplicación de la termodinámica a procesos biológicos. Disoluciones poliméricas: modelos de red. Teoría de Flory – Huggins. Teoría de Prigogine-Flory-Paterson. Viscosidad intrínseca y peso molecular promedio

Unidad 6

Ventajas y limitaciones de la catálisis homogénea. Complejos inorgánicos y organometálicos como catalizadores. Metales y ligandos en catálisis. Ciclos catalíticos. Pasos elementales.

Unidad 7

Principales procesos. Isomerización. Carbonilación. Hidroformilación. Hidrocianación e hidrosililación. Oligomerización, polimerización y metátesis de olefinas.

Unidad 8

Prácticas de laboratorio relacionadas con las unidades 1, 2 y 3.

10.3- Bibliografía

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

Assel M. J., Trusler J. P. M y Tsolakis T. F., (1998) Thermophysical Properties of Fluids, Imperial Collage Press,

Bevan Ott J. y Boerio-Goates J., Chemicals Thermodynamics. Advanced Applications., Academic Press,

C. Gómez-Moreno y J. Sancho Sanz, (2003) Estructutura de Proteinas, Ariel Ciencia, C.M. Starks, C.L. Liotta, M. Halpern, (1994) Phase Transfer Catalysis, Chapman & Hall,

C.R. Cantor, P. R. Schimmel, (1980) Biophysical Chemistry, W.H. Freeman and Company,,

Gates, B. C, (1992.) Catalytic Chemistry, Wiley,

Howard Maskill, (2006) The investigation of organic reactions and their mechanisms, Blackwell Publishing, 1-4051-3142-X,

J. Reedijk, E. Bouwman, (1999) Bioinorganic Catalysis, Marcel Dekker,

James Allen, (2008) Biophysical Chemistry, Wiley-Blackwel, 9781405121362,

Muriel J. N., y Jenkins A. D., (1997) Properties of Liquids and Solutions, 2, John Wiley & Sons,

Prausnitz, J. M., Lichtenthaler R. N. y Gomes de Acebo E., (2001) Termodinámica Molecular de los equilibrios de fases, Prentice Hall,



van Leeuwen, P.W.N.M., Kluwer, (2004) Homogeneous Catalysis,
van Ness H. C., Smith J. M. y Abbot M. M, (1997) Introducción a la Termodinámica en la Ingeniería Química, McGraw-Hill,

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

E.F.Caldin, (2001) The Mechanism of Fast Reaction in Solution, IOS Press,

11. Metodología de enseñanza y aprendizaje y su relación con las competencias que debe adquirir el estudiante:

Metodología	Competencia relacionada	Horas presenciales	Horas de trabajo	Total de horas
Clases Teóricas	Todas	30	57	87
Clases Prácticas	Todas	10	15	25
Realización de Pruebas	Todas	5	8	13
Total		45	80	125

12. Sistemas de evaluación:

Todos los procedimientos de evaluación son recuperables en la segunda convocatoria. Para realizar la media ponderada aritmética será necesario alcanzar al menos un 3 sobre 10 en cada uno de los diferentes procedimientos de evaluación. Para aprobar la asignatura, la nota media aritmética ponderada de ser igual o superior a 5 sobre 10.

Procedimiento	Peso
Informes, problemas, cuestionarios planteados a lo largo de la asignatura.	40 %
Prueba final.	30 %
Realización y presentación de un trabajo.	30 %
Total	100 %



Evaluación excepcional:

Se ajustarán individualmente los diferentes procedimientos de evaluación de los alumnos que soliciten la evaluación excepcional para que puedan hacer las diferentes pruebas.

13. Recursos de aprendizaje y apoyo tutorial:

Se realizarán a través de la plataforma MOODLE

14. Calendarios y horarios:

Tanto el calendario académico como los horarios se encuentran publicados en la página WEB del Máster.

15. Idioma en que se imparte:

Español