



GUÍA DOCENTE 2012-2013

Procesos en disolución: cinética y termodinámica de reacciones complejas.

1. Denominación de la asignatura:

Procesos en disolución: cinética y termodinámica de reacciones complejas.

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 más 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 Específicas:

- Manipulación con seguridad de materiales químicos.
- Aspectos principales de terminología química, nomenclatura, convenios y unidades.
- Tipos de reacción química y sus principales características asociadas.
- Reconocimiento y análisis de nuevos problemas y planear estrategias para solucionarlos.
- Valoración de riesgos en el uso de sustancias químicas y procedimientos de laboratorio.
- Capacidad para demostrar el conocimiento y comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionadas con las áreas de la Química.
- Planificación, diseño y ejecución de investigaciones prácticas, desde la etapa problema-reconocimiento hasta la evaluación y valoración de resultados y descubrimientos.
- Interpretación de datos procedentes de observaciones y medidas en el laboratorio en términos de su significación y de las teorías que las sustentan.
- Ser consciente de las posibilidades, limitaciones y costes de material biológico, así como de las técnicas instrumentales más adecuadas para su caracterización.
- Adquirir habilidades y sistemática en el trabajo relacionado con procesos catalíticos.
- Ser capaz de trabajar en el laboratorio conforme a las normas de seguridad y respeto al medio ambiente.
- Ser capaz de aplicar críticamente el método científico al estudio teórico y experimental de nuevos materiales.
- Ser capaz de realizar un informe técnico que pueda ser comprendido por cualquier persona no experta en la materia.
- Ser capaz de realizar una presentación oral y realizar una discusión en grupo de los resultados de un estudio teórico o experimental.
- Adquirir habilidades teóricas y experimentales que permitan asimilar otras más complejas.

Competencias Generales:

- Habilidades de comunicación oral y escrita en la lengua nativa.
- Habilidades para la búsqueda y obtención de información.



- Habilidades para el análisis, síntesis, elaboración y presentación de informes.
- Habilidades para la resolución de problemas cualitativos y cuantitativos.
- Habilidades para aplicar los conocimientos teóricos adquiridos.
- Habilidades y destrezas en todos los aspectos prácticos relacionados con el trabajo en un laboratorio.
- Habilidades para el estudio y el aprendizaje de forma autónoma, necesarios para la formación continua y el desarrollo profesional.
- Habilidades relacionadas con las herramientas informáticas y con las tecnologías de la información.
- Habilidades interpersonales, apropiadas para la relación con otras personas y para la integración en grupos de trabajo.
- Capacidad para la toma de decisiones.
- Habilidad para integrar la calidad como una de las variables más importantes a considerar.
- Habilidades en la aplicación del razonamiento deductivo y en el aprovechamiento de la capacidad creativa, mediante la introducción en la investigación.
- Capacidad para reconocer los aspectos relacionados con la seguridad en el trabajo y el impacto medioambiental como pautas primordiales de su ejercicio profesional.

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 en la calificación final
Evaluación continua: En ella se valorará la participación activa del alumno, sus respuestas a los supuestos teórico-prácticos propuestos, el desarrollo de trabajo en el laboratorio y, en su caso, la realización y presentación de informes.	40 %
Prueba final: Consistirá en una prueba final escrita del conjunto de la asignatura, de cuatro horas de duración y consistente en la resolución de cuestiones y problemas seleccionados.	30 %
Realización y presentación de un trabajo: Cada alumno deberá elaborar un trabajo escrito, que deberá presentar en público(durante 30 minutos) y defender ante los profesores de la asignatura. El tema del trabajo deberá elegirse de entre los propuestos por los profesores.	30 %
Total	100 %



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