

Guía docente de la asignatura

**Dinámica de Procesos y
Reacciones Químicas**Fecha última actualización: 09/07/2021
Fecha de aprobación por la Comisión
Académica: 26/07/2021**Máster**

Máster Universitario en Ciencias y Tecnologías Químicas, Khemia

MÓDULO

Avances en Química

RAMA

Ciencias

**CENTRO RESPONSABLE
DEL TÍTULO**

Escuela Internacional de Posgrado

Semestre

Primero

Créditos

3

Tipo

Optativa

**Tipo de
enseñanza**

Presencial

BREVE DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS (Según memoria de verificación del Máster)

Teorías de las velocidades de reacción. Reacciones complejas con intervención de átomos y radicales libres. Polimerización. Reacciones fotoquímicas. Reacciones en disolución. Mecanismos de catálisis homogénea. Cinética enzimática. Reacciones en superficies de sólidos. Cinética electroquímica.

COMPETENCIAS**COMPETENCIAS BÁSICAS**

- CB6 - Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en 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.

COMPETENCIAS GENERALES

- CG01 - Que los estudiantes sepan asumir las responsabilidades adecuadas en lo que respecta al desarrollo de conocimientos y/o prácticas profesionales

COMPETENCIAS ESPECÍFICAS

- CE01 - Poseer y comprender conocimientos químicos avanzados, tanto a nivel teórico como de su aplicación práctica.
- CE02 - Aplicar conocimientos teórico-prácticos a la resolución de problemas científico-técnicos relacionados con las ciencias y tecnologías químicas.
- CE03 - Comprender, analizar y solucionar problemas avanzados relacionados con la Química mediante el uso de las herramientas y metodologías aprendidas.

COMPETENCIAS TRANSVERSALES

- CT02 - Capacidad de gestión del tiempo (referida a su organización y planificación)
- CT06 - Trabajo en equipo

RESULTADOS DE APRENDIZAJE (Objetivos)

Tras cursar esta asignatura, el alumno sabrá/comprenderá:

- (1) Los hechos, conceptos, principios y teorías esenciales que gobiernan la velocidad de los procesos y reacciones químicas.
- (2) Describir los factores necesarios para el control de la velocidad de una reacción.
- (3) Determinar la naturaleza, intensidad y extensión de los cambios energéticos que acompañan a cualquiera de las etapas por las que transcurre una reacción.
- (4) Interpretar el comportamiento del dinámico de un sistema químico en función de las características microscópicas del mismo, expresadas éstas en términos atómico-moleculares.
- (5) Interpretar datos derivados de las observaciones y medidas de laboratorio en términos de su importancia y para relacionarlos con teorías cinéticas apropiadas.
- (6) Formular cuantitativamente la ley de velocidad de una reacción según su mecanismo.
- (7) Proponer mecanismos apropiados para un proceso o reacción química tomando como base las observaciones experimentales.
- (8) Aplicar los conocimientos adquiridos a la resolución de problemas cualitativos y cuantitativos del entorno cotidiano.



PROGRAMA DE CONTENIDOS TEÓRICOS Y PRÁCTICOS**TEÓRICO****Tema 1. Fundamentos de cinética.**

Cinética formal de la reacción química.

Métodos experimentales.

Determinación de mecanismos de reacción.

Tema 2. Dinámica molecular.

Teoría del estado de transición.

Teoría de colisiones.

Dinámica molecular de las reacciones.

Tema 3. Cinética de reacciones complejas.

Reacciones entre átomos y radicales libres. Reacciones en cadena. Explosiones.

Cinética de polimerización.

Reacciones fotoquímicas.

Reacciones en disolución.

Tema 4. Catálisis y reacciones en superficies.

Mecanismos de catálisis homogénea.

Cinética enzimática.

Reacciones en superficies de sólidos.

Catálisis heterogénea

Cinética de reacciones en electrodos.

PRÁCTICO

Se llevará a cabo el análisis de datos experimentales proporcionados por el profesor, de acuerdo a modelos cinéticos adecuados y haciendo uso del software específico.



BIBLIOGRAFÍA

BIBLIOGRAFÍA FUNDAMENTAL

- Laidler, K.J. Cinética de reacciones. 2ª Ed. Editorial Alhambra. Madrid, 1979.
- Laidler, K.J. Chemical Kinetics. 2ª ed. Ed. Tata Mac Graw-Hill, Nueva Delhi, 1994.
- Engel, T., Reid, P. Química Física. Pearson Education, Madrid, 2012.
- Logan, S.R., Pando García-Pumarino, C. Fundamentos de Cinética Química. Addison Wesley Iberoamericana, Madrid, 2001.
- Atkins, P.W.; de Paula, J. Química Física, 8ª Ed. Editorial Medica Panamericana, Buenos Aires, 2008.
- González Ureña A. Cinética Química. Editorial Síntesis. Madrid, 2001.
- Senent Pérez, S. Química Física II: Cinética Química, 2ª Ed. Editorial UNED, Madrid, 2000.

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

- Levine, I.N. Físicoquímica, 6ª Ed. McGraw Hill. México 2014.
- Moore, J.W., Pearson, R.G. Kinetics and Mechanism, 3ª Ed. John Wiley and Sons. New York, 1981.
- Steinfeld, J.I. Francisco, J.S., Hase, W.L. Chemical Kinetics and Dynamics. Editorial Prentice Hall. Englewood Cliffs, New Jersey, 1989.
- Levine, R.D. Molecular reaction dynamics. Cambridge University Press, New York, 2004.
- House, J. E. Principles of chemical kinetics. 2nd ed. Elsevier/Academic Press, 2007.

ENLACES RECOMENDADOS

Página web de Tenua: <http://bililite.com/tenua/>

Tenua es un simulador de cinéticas programado en Java. Ha sido programado por Daniel Wachsstock y está basado en KINSIM de Bruce A. Barshop, de la Washington University Chemistry Computing Facility.

Página web de Scidavis: <http://scidavis.sourceforge.net/>

Scidavis es un programa gratuito para análisis y visualización de datos científicos.

Plataforma docente PRADO: <https://prado.ugr.es>, donde se contiene toda la información y material docente de la asignatura.

METODOLOGÍA DOCENTE

- MD01 Clases magistrales/expositivas. El equipo docente podrá utilizar para su desarrollo algunos de los siguientes métodos: sesión expositiva, aprendizaje basado en problemas, ejemplificación y estudio de casos.
- MD03 Clases prácticas. El equipo docente podrá recurrir a métodos como estudio de casos, análisis diagnósticos, prácticas de laboratorio, aula de informática, visitas, búsqueda de datos, etc.
- MD04 Talleres, seminarios, debates, exposición (y/o defensa) de trabajos individuales o en grupo. El equipo docente podrá utilizar para su desarrollo algunos de los siguientes



- métodos: aprendizaje basado en problemas, ejemplificación y estudio de casos
- MD05 Tutorías: Programadas y de seguimiento (para trabajos de fin de Máster y Prácticas de Empresa), pudiéndose utilizar en las modalidades personalizada o en grupo, sincrónica (presenciales) o asincrónica (virtuales). La modalidad seleccionada por el equipo docente quedará recogida en la Guía Docente de cada materia
 - MD07 Estudio y trabajo autónomo, individual y/o en grupo

EVALUACIÓN (instrumentos de evaluación, criterios de evaluación y porcentaje sobre la calificación final)

EVALUACIÓN ORDINARIA

Elementos de evaluación:

- Control de asistencia y participación activa en clase. Se basa en la valoración de actitudes e iniciativas de participación activa e interactiva en el desarrollo de la clase, o en el grado de compromiso en el desarrollo de los trabajos planeados o cualquier otra tarea asignada, pudiéndose evaluar, si procede, la capacidad de trabajo en equipo.
- Resolución de ejercicios o proyectos. Proyecto o conjunto de ejercicios que el alumno deberá ir resolviendo a lo largo del curso.
- Examen final que consistirá en ejercicios de razonamiento y cálculo.

La calificación final será el resultado de aplicar los siguientes porcentajes:

- Examen final: 40%.
- Informes de los talleres realizados, evaluación del manejo de software, análisis e interpretación de datos experimentales: 30%
- Resolución de ejercicios propuestos: 20%
- Actitud y participación activa en clase: 10%.

EVALUACIÓN EXTRAORDINARIA

Examen final. La evaluación en convocatoria extraordinaria corresponderá a un solo examen escrito que constará de una serie de preguntas teóricas y de resolución de problemas prácticos. La puntuación obtenida en este examen constituirá el 100% de la calificación otorgada siguiendo este tipo de evaluación.

EVALUACIÓN ÚNICA FINAL

Este sistema de evaluación será aplicable únicamente para evaluar a alumnos que, de acuerdo con la Normativa de Evaluación y Calificación aprobada por la UGR en Consejo de Gobierno de 9 de noviembre de 2016, soliciten y se les conceda esta modalidad de evaluación.

Examen final. La evaluación única corresponderá a un solo examen escrito que constará de una serie de preguntas teóricas y de resolución de problemas prácticos. La puntuación obtenida en este examen constituirá el 100% de la calificación otorgada siguiendo este tipo de evaluación.

