



Guía Docente				
Datos Identificativos				2012/13
Asignatura (*)	Cinetoquímica	Código	610311405	
Titulación				
Descritores				
Ciclo	Período	Curso	Tipo	Créditos
1º e 2º Ciclo	2º cuatrimestre	Cuarto	Obrigatoria	4
Idioma	CastelánInglés			
Prerrequisitos				
Departamento	Química Física e Enxeñaría Química 1			
Coordinación	Iglesias Martínez, Emilia	Correo electrónico	emilia.iglesias@udc.es	
Profesorado	Iglesias Martínez, Emilia	Correo electrónico	emilia.iglesias@udc.es	
Web	campusvirtual.udc.es			
Descrición xeral	<p>DESCRITORES: Modelos cinéticos. Reacciones en disolución. Cinética electroquímica</p> <p>CONTEXTUALIZACIÓN: La Cinética Química introduce la variable tiempo en el estudio de una reacción química, analizando los factores que modifican la velocidad de evolución de los procesos de reacción con el fin de deducir la ecuación de velocidad para finalmente proponer un mecanismo de reacción que interprete a nivel molecular la reacción macroscópica observada. Previamente al estudio cinético, se ha de disponer del conocimiento preciso de la estequiometría y de la Termodinámica de la reacción, para abordar en la asignatura de Cinetoquímica los fundamentos teóricos y técnicos que permitan el estudio integral de cualquier proceso reactivo.</p>			

Competencias da titulación	
Código	Competencias da titulación

Resultados da aprendizaxe			
Competencias de materia (Resultados de aprendizaxe)	Competencias da titulación		
Metodolóxicas: - Ser capaces de plantear / diseñar el estudio cinético de una reacción química. - Aplicación programas informáticos sencillos al análisis cuantitativo de datos cinéticos. - Interpretación de los resultados en base a un mecanismo de reacción. - Simulación / predicción de datos inéditos a partir de la ecuación de velocidad	A4 A10 A14 A20 A22 A23 A24 A27	B1 B2 B3 B4 B7	C8
Conceptuales: - Dominio de los métodos propios de la cinética química. - Interpretación a nivel molecular (mecanicista) de las reacciones químicas. - Comprender y conocer los factores que puedan modificar la velocidad de una reacción.	A1 A4 A5 A10 A14 A16	B1 B2 B3	
Actitudinales: - Presentar informes adecuados de un estudio cinético. - Analizar y criticar estudios cinéticos publicados de dificultad baja.		B4 B5 B7	C3 C7 C8

Contidos	
Temas	Subtemas



Ecuación de velocidad y mecanismos de reacción	Definiciones básicas en Cinética Química. Métodos cinéticos en el estudio de una reacción. Propiedades químico-físicas proporcionales a la concentración. Relación concentración-propiedad. Técnicas experimentales en cinetoquímica. Modelos complejos de reacción. Ecuación de velocidad: interpretación mecanicista.
Teorías cinetoquímicas	Influencia de la temperatura: energía de activación. Teoría de colisiones: frecuencia de colisiones, choques eficaces, sección eficaz de colisión. Teoría del estado de transición. Curvas de energía potencial: Dinámica molecular. Formulación según la Termodinámica Estadística. Formulación Termodinámica: entropía y entalpía de activación.
Reacciones en fase gas	Reacciones unimoleculares. Teoría de Lindemann. Correcciones. Reacciones en cadena: lineal y ramificada. Mecanismos de Rice-Herzfeld.
Reacciones en disolución	?Efecto jaula?. Influencia del disolvente y de la presión en la velocidad de reacción. Reacciones entre iones: efecto salino primario (modelo de Brønsted-Bjerrum); efecto salino secundario (modelo de Debye-Hückel). Reacciones de transferencia electrónica. Teoría de Marcus Reacciones controladas por difusión. Modelo de Smoluchowski.
Catálisis homogénea	Mecanismo general de catálisis. Catálisis ácido-base: correlaciones de Bronsted; efectos isotópicos de deuterio. Catálisis nucleófila Catálisis microheterogénea: catálisis enzimática y micelar. Receptores moleculares
Reacciones fotoquímicas	Procesos fotofísicos y fotoquímicos primarios: diagrama de Jablonski. Rendimientos cuánticos: ?quenching?. Tiempos de vida. Técnica de flash-fotólisis. Reacciones en la atmósfera.
Introducción al estudio de reacciones electroquímicas	Cinética de las reacciones electródicas: etapa de transferencia de carga. Deducción cinética de la ecuación de Nernst.

Planificación

Metodoloxías / probas	Horas presenciais	Horas non presenciais / traballo autónomo	Horas totais
Proba obxectiva	4	0	4
Atención personalizada	3	0	3

*Os datos que aparecen na táboa de planificación son de carácter orientativo, considerando a heteroxeneidade do alumnado

Metodoloxías

Metodoloxías	Descrición
Proba obxectiva	? Resolución de cuestiones de teoría y de ejercicios en relación con los temas tratados en las clases de teoría, de seminario y en las prácticas del aula de informática.

Atención personalizada

Metodoloxías	Descrición
Proba obxectiva	Ayuda personalizada en todas las cuestiones relacionadas con el contenido de la asignatura durante la preparación de la prueba de examen por cuenta del alumno.

Avaliación



Metodoloxías	Descrición	Cualificación
Proba obxectiva	? Realización de examen escrito de cuestións teóricas e de resolución de exercicios relacionadas con los contenidos de la asignatura que se hayan abordado en las diferentes actividades.	100
Outros		

Observacións avaliación

Fontes de información

Bibliografía básica	<ul style="list-style-type: none">- J. H. ESPENSON (2002). Chemical Kinetics&Reaction Mechanisms, 2ª ed.. McGraw-Hill- K. J. LAIDLER (1987). Chemical Kinetics, 3ª Ed.. HarperCollins Publ.- S. R. LOGAN (2000). Fundamentos de Cinética Química. Addison Wesley- P. W. ATKINS, J. de PAULA (2008). Química Física, 8ª Ed.. Panamericana
Bibliografía complementaria	<ul style="list-style-type: none">- M. R. Wright (2004). An Introduction to Chemical Kinetics. John Wiley&Sons, Ltd.- P. L. Brezonik (1994). Chemical Kinetics and Process Dynamic in Aquatic Systems. Lewis Publishers- A. González-Ureña (2001). Cinética Química. Sínteis- P. Sanz Pedredo (1992). Físicoquímica para Farmacia y Biología. Masson-Salvat Medicina- R. A. Jackson (2004). Mechanism in Organic Reactions. Royal Society of Chemistry (RSC)

Recomendacións

Materias que se recomenda ter cursado previamente

Experimentación en Química Física/610311507

Química Física Avanzada/610311501

Materias que se recomenda cursar simultaneamente

Cinética dos Procesos Contaminantes/610311623

Materias que continúan o temario

Introdución a Espectroscopia/610311304

Técnicas Experimentais en Química Física/610311305

Observacións

Prerrequisitos:

- Son necesarios los conocimientos de las asignaturas de primer curso (Estructura atómica y enlace químico, Matemáticas -en especial, cálculo diferencial e integral-, Física en lo referente a la parte de Termodinámica), de segundo curso (Química Física) y del tercer curso (Técnicas experimentales en Química Física, Introducción a espectroscopia)
- Saber redactar, sintetizar y presentar ordenadamente un trabajo.
- Dominar la representación gráfica, regresión lineal con conocimientos básicos de estadística.
- Utilizar a nivel de usuario herramientas básicas de informática: Excel, Word, Power Point.
- Se recomienda conocer ingles con nivel medio de comprensión de lectura.

(*A Guía docente é o documento onde se visualiza a proposta académica da UDC. Este documento é público e non se pode modificar, salvo casos excepcionais baixo a revisión do órgano competente dacordo coa normativa vixente que establece o proceso de elaboración de guías