



1. DATOS GENERALES

Asignatura: TÉCNICAS EXPERIMENTALES EN CINÉTICA QUÍMICA

Código: 310585

Tipología: OBLIGATORIA

Créditos ECTS: 6

Grado: 2326 - MASTER UNIVERSITARIO EN INVESTIGACIÓN EN QUÍMICA

Curso académico: 2019-20

Centro: 1 - FTAD. CC. Y TECNOLOGÍAS QUÍMICAS CR.

Grupo(s): 20

Curso: 1

Duración: C2

Lengua principal de impartición: Español

Segunda lengua: Inglés

Uso docente de otras lenguas:

English Friendly: S

Página web: <http://campusvirtual.uclm.es>

Bilingüe: N

Profesor: ELENA JIMENEZ MARTINEZ - Grupo(s): 20				
Edificio/Despacho	Departamento	Teléfono	Correo electrónico	Horario de tutoría
EDIFICIO MARIE CURIE, 2ª PLANTA	QUÍMICA FÍSICA	926052129	elena.jimenez@uclm.es	Monday, Tuesday and Wendsday: 13:30-14.30 16:00-17:00
Profesor: ALBERTO NOTARIO MOLINA - Grupo(s): 20				
Edificio/Despacho	Departamento	Teléfono	Correo electrónico	Horario de tutoría
Edificio Marie Curie, primera planta	QUÍMICA FÍSICA	6347	alberto.notario@uclm.es	Monday, Tuesday and Wendsday: 11:30-13:30
Profesor: FRANCISCO JAVIER POBLETE MARTIN - Grupo(s): 20				
Edificio/Despacho	Departamento	Teléfono	Correo electrónico	Horario de tutoría
EDIFICIO MARIE CURIE 2ª PLANTA, DESPACHOS 2.03	QUÍMICA FÍSICA	926052177	fcojavier.poblete@uclm.es	Miércoles y Jueves: 9:00h-11:00h 12:30h-13:30h

2. REQUISITOS PREVIOS

No se han establecido.

3. JUSTIFICACIÓN EN EL PLAN DE ESTUDIOS, RELACIÓN CON OTRAS ASIGNATURAS Y CON LA PROFESIÓN

Esta asignatura forma parte de la Materia **Química Física Avanzada** correspondiente al Módulo I del Máster en Investigación en Química. El objetivo de la asignatura es que los alumnos profundicen en los conocimientos de Cinética Química previamente adquiridos en el Grado, particularmente en aquellos que se refieren a las cinéticas de las reacciones rápidas y las técnicas experimentales que actualmente se emplean en el campo de la investigación para su estudio. La Cinética Química es una de las ramas de la Química Física más activa en investigación tanto en fase homogénea (disolución o gaseosa) como en fase heterogénea (gas-sólido, gas-líquido y sólido-líquido). La Cinética de las reacciones químicas tiene gran importancia en la industria de síntesis industrial. Algunas de las aplicaciones del estudio cinético de reacciones rápidas son: la elucidación de los mecanismos y la velocidad de degradación de contaminantes atmosféricos, en el control de fármacos y alimentos, en catálisis, etc.

4. COMPETENCIAS DE LA TITULACIÓN QUE LA ASIGNATURA CONTRIBUYE A ALCANZAR

Competencias propias de la asignatura

Código	Descripción
E07	Conocer los principios de química sostenible y las normas de seguridad para la manipulación de productos químicos conocidos de nueva síntesis fruto de actividades de investigación.
E08	Conocer la cinética de los procesos químicos, incluyendo la catálisis, los mecanismos de reacción y los métodos y técnicas utilizados para su determinación.
G01	Conocer la precisión de los datos experimentales y su utilización para la planificación del trabajo experimental de investigación.
G02	Tener la habilidad necesaria para la realización de procedimientos de laboratorio avanzado y el uso de instrumentación en el trabajo sintético y analítico.
T02	Capacidad para trabajar en equipo y, ejercer funciones de liderazgo, fomentando el carácter emprendedor
T04	Capacidad de utilización de software específico para investigación en química.
T05	Capacidad de obtener información bibliográfica a nivel de investigación, incluyendo recursos en Internet (bases de datos, bibliografía científica especializada, redes sociales, etc...), así como llevar a cabo una selección y clasificación de la misma.

5. OBJETIVOS O RESULTADOS DE APRENDIZAJE ESPERADOS

Resultados de aprendizaje propios de la asignatura

Descripción

Aplicar el conocimiento sobre las metodologías empleadas en la obtención y el análisis de datos cinéticos.

Aplicar los conocimientos adquiridos a la realización de un experimento cinético en el laboratorio.

Aplicar los métodos de detección en un sistema experimental heterogéneo.

Determinar correctamente el coeficiente de velocidad.

Interpretar los resultados de un estudio cinético o computacional y presentarlos adecuadamente, complementados con la información obtenida de la búsqueda bibliográfica realizada previamente.

Utilizar correctamente las principales técnicas experimentales empleadas en el estudio cinético de reacciones.

Realizar pruebas extracinetéticas con el fin de conocer el mecanismo de reacción.

Resultados adicionales

- 1) Utilizar correctamente las principales técnicas experimentales empleadas en el estudio cinético de reacciones.
 - 2) Aplicar el conocimiento sobre las metodologías empleadas en la obtención y el análisis de datos cinéticos.
 - 3) Determinar correctamente el coeficiente de velocidad y la ecuación de velocidad experimental.
 - 4) Establecer relaciones estructura - reactividad mediante correlaciones empíricas.
 - 5) Realizar pruebas extracínéticas con el fin de conocer el mecanismo de reacción.
 - 6) Interpretar los resultados de un estudio cinético o computacional y presentarlos adecuadamente, complementados con la información obtenida de la búsqueda bibliográfica realizada previamente.
 - 7) Aplicar los métodos de detección en un sistema experimental heterogéneo.
 - 8) Aplicar los conocimientos adquiridos a la realización de un experimento cinético en el laboratorio.
 - 9) Utilizar adecuadamente el software para investigación empleado en las prácticas de laboratorio y en el aula de informática
- 1) Utilizar correctamente las principales técnicas experimentales empleadas en el estudio cinético de reacciones.
 - 2) Aplicar el conocimiento sobre las metodologías empleadas en la obtención y el análisis de datos cinéticos.
 - 3) Determinar correctamente el coeficiente de velocidad y la ecuación de velocidad experimental.
 - 4) Establecer relaciones estructura - reactividad mediante correlaciones empíricas.
 - 5) Realizar pruebas extracínéticas con el fin de conocer el mecanismo de reacción.

6. TEMARIO

Tema 1: TEMA 1. CINÉTICA DE REACCIONES RÁPIDAS. TÉCNICAS DE FLUJO Técnica de Flujo Continuo. Técnica de Flujo acelerado. Técnica de Flujo Detenido. Aplicación de la Técnica de Flujo Detenido a las reacciones en fase gaseosa.

Tema 2: TEMA 2. CINÉTICA DE REACCIONES RÁPIDAS. TÉCNICAS DE RELAJACIÓN Perturbación Instantánea: Salto instantáneo de temperatura y de presión. Método de los tubos de choque. Perturbación continua y periódica.

Tema 3: TEMA 3. CINÉTICA DE REACCIONES RÁPIDAS. MÉTODOS DE INICIACIÓN MEDIANTE RADIACIONES INTENSAS Y ESPECTROSCOPIAS DE RESONANCIA Fotólisis por destellos. Fotólisis Láser. Radiólisis pulsada. Espectroscopia de Resonancia Magnética Nuclear. Espectroscopia de Espín Electrónico.

Tema 4: TEMA 4. TÉCNICAS EXPERIMENTALES EN CINÉTICA EN FASE GASEOSA Sistemas de Iniciación de la Reacción. Sistemas de Reacción. Métodos de Detección Espectroscópicos. Técnicas Cinéticas Absolutas y Relativas. Descarga en Tubo de Flujo Rápido (DFF). Fotólisis Pulsada/ Fluorescencia Inducida por Láser (PLP/LIF). Espectroscopia de Absorción Resuelta en el Tiempo con Láser de Diodos (TLDAS). Espectroscopia de Cavity Ring-down (CRDS). Correlaciones estructura-reactividad. Método SAR (structure-activity relationship)

Tema 5: TEMA 5. TÉCNICAS EXPERIMENTALES EN LAS QUE ESTÁN INVOLUCRADOS AEROSOLES. Importancia de los aerosoles. Procesos de formación en la atmósfera. Sistemas experimentales establecidos para estudiar reacciones heterogéneas. Nuevas técnicas de espectrometría de masas para estudio procesos atmosféricos heterogéneos. Técnicas para caracterizar aerosoles en el ambiente (propiedades ópticas de aerosoles, transporte atmosférico de aerosoles, caracterización mediante medios espaciales, terrestres y plataformas suborbitales). Procesos de adsorción en diferentes superficies. Caracterización de procesos de adsorción en condiciones de equilibrio. Mecanismo de adsorción de gases sobre superficies líquidas. Sistema experimental para estudiar reacciones heterogéneas con hielo y polvo.

Tema 6: P1. Cinética en Disolución

Tema 7: PRÁCTICA 2. CINÉTICA DE LA REACCIÓN DEL RADICAL Cs MEDIANTE FOTÓLISIS PULSADA Y FLUORESCENCIA INDUCIDA PRO LÁSER. En esta práctica se determina la constante de velocidad de una reacción bimolecular en fase gaseosa ($Cs + CFCI_3$). Cs se genera por fotólisis UV de $CsCl$ y mediante el seguimiento espectroscópico de la intensidad de fluorescencia inducida por láser de Cs a diferentes tiempos de reacción se obtienen los datos cinéticos.

Tema 8: PRÁCTICA 3: CINÉTICA DE LA REACCIÓN DE NO_3 MEDIANTE MÉTODOS RELATIVOS

Tema 9: PRÁCTICA 4. Caracterización mediante la técnica de SMPS de la formación de aerosoles orgánicos secundarios, SOA, a partir de la reacción de ozonólisis de diferentes compuesto orgánicos.

7. ACTIVIDADES O BLOQUES DE ACTIVIDAD Y METODOLOGÍA

Actividad formativa	Metodología	Competencias relacionadas (para títulos anteriores a RD 822/2021)	ECTS	Horas	Ev	Ob	Rec	Descripción
Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL]	Método expositivo/Lección magistral	E08 G01 G02	1	25	S	N	S	Clases magistrales. Se presentan los contenidos teóricos de la asignatura junto con ejemplos de aplicación
Talleres o seminarios [PRESENCIAL]	Resolución de ejercicios y problemas	E08 G01 G02 T04 T05	0.56	14	S	N	S	Seminarios. Se resolverán con participación activa de los alumnos problemas que permitan una mejor comprensión de la asignatura
Otra actividad no presencial [AUTÓNOMA]	Trabajo dirigido o tutorizado	E08 G01 T05	3.6	90	S	S	S	Caso Práctico. Se planteará un caso práctico que permita al alumno diseñar la óptima técnica experimental para el estudio cinético de una determinada reacción. Así como la determinación de la ecuación experimental de velocidad y el empleo de pruebas extracínéticas para la determinación del mecanismo de reacción.
Prácticas de laboratorio [PRESENCIAL]	Prácticas	E07 T02 T04	0.52	13	S	S	S	Prácticas de laboratorio. El alumno manejará algunas de las técnicas experimentales en Cinética Química disponibles en los laboratorios de investigación
Tutorías individuales [PRESENCIAL]	Otra metodología		0.2	5	S	N	S	Discusión de Conceptos y Resolución de dudas
Pruebas de progreso [PRESENCIAL]	Pruebas de evaluación	E08 G01 G02	0.04	1	S	N	S	Pruebas de evaluación parciales.

Prueba final [PRESENCIAL]	Pruebas de evaluación	E08 G01 G02	0.08	2	S	S	S	Esta prueba consistirá en un examen tipo test de cada una de las partes de la asignatura
Total:			6	150				
Créditos totales de trabajo presencial: 2.4			Horas totales de trabajo presencial: 60					
Créditos totales de trabajo autónomo: 3.6			Horas totales de trabajo autónomo: 90					

Ev: Actividad formativa evaluable

Ob: Actividad formativa de superación obligatoria

Rec: Actividad formativa recuperable

8. CRITERIOS DE EVALUACIÓN Y VALORACIONES			
Sistema de evaluación	Valoraciones		Descripción
	Estudiante presencial	Estud. semipres.	
Pruebas de progreso	20.00%	0.00%	Evaluación de contenidos teóricos y ejercicios.
Elaboración de memorias de prácticas	20.00%	0.00%	Evaluación continua de trabajo en laboratorio y de la memoria de laboratorio
Resolución de problemas o casos	20.00%	0.00%	Y resolución de seminarios y casos prácticos.
Otro sistema de evaluación	10.00%	0.00%	Tutorías
Prueba final	30.00%	0.00%	Prueba tipo test de los contenidos de cada parte de la asignatura.
Total:	100.00%	0.00%	

Crterios de evaluación de la convocatoria ordinaria:

Los especificados en la tabla anterior.

Nota aclaratoria:

El caso práctico propuesto por el equipo docente de forma individualizada se tutorizará a lo largo de todo el cuatrimestre. El alumno debe entregar un informe escrito de ese trabajo y realizará una exposición oral del mismo.

Particularidades de la convocatoria extraordinaria:

En esta convocatoria, la calificación del trabajo de laboratorio y la memoria científica correspondiente se mantendrá.

9. SECUENCIA DE TRABAJO, CALENDARIO, HITOS IMPORTANTES E INVERSIÓN TEMPORAL	
No asignables a temas	
Horas	Suma horas

10. BIBLIOGRAFÍA, RECURSOS						
Autor/es	Título/Enlace Web	Editorial	Población	ISBN	Año	Descripción
Equipo Docente	APUNTES FACILITADOS POR LOS PROFESORES					Disponibles en la plataforma Moodle
Finlayson-Pitts and Pitts	Chemistry of the upper and lower atmosphere	Academic Press			2000	
LAIDLER, Keith J.	Chemical kinetics	Harper & Row		0-06-043862-2	1987	
S. Senent.	QUÍMICA FÍSICA II.	Uned.			1985	
S.R. Logan	FUNDAMENTOS DE CINÉTICA QUÍMICA	Addison Wesley.			1996	