



**PROGRAMA DE LA ASIGNATURA**  
**"Cinética Química de Procesos de Transferencia de Carga"**

Máster Universitario en Estudios Avanzados en Química  
Departamento de Química Física  
Facultad de Química

**DATOS BÁSICOS DE LA ASIGNATURA**

<b>Titulación:</b>	Máster Universitario en Estudios Avanzados en Química
<b>Año del plan de estudio:</b>	2010
<b>Centro:</b>	Facultad de Química
<b>Asignatura:</b>	Cinética Química de Procesos de Transferencia de Carga
<b>Código:</b>	50750004
<b>Tipo:</b>	Optativa
<b>Curso:</b>	1º
<b>Período de impartición:</b>	Anual
<b>Ciclo:</b>	2
<b>Área:</b>	Química Física (Área responsable)
<b>Horas :</b>	100
<b>Créditos totales :</b>	4.0
<b>Departamento:</b>	Química Física (Departamento responsable)
<b>Dirección física:</b>	FACULTAD DE QUÍMICA, C/ PROFESOR GARCÍA GONZÁLEZ, S/N 41012 - SEVILLA
<b>Dirección electrónica:</b>	<a href="http://www.quimfis.us.es/">http://www.quimfis.us.es/</a>

**OBJETIVOS Y COMPETENCIAS**

**Objetivos docentes específicos**

El objetivo general del curso es el estudio de los procesos de transferencia de carga en fases sólida y líquida, así como en interfases. Una primera parte del curso está destinada a la descriptiva general de estos procesos (conceptos teóricos y modelos), mientras que otra hace especial hincapié en el estudio concreto de ejemplos de transferencia electrónica en medios homogéneos y heterogéneos. Para esto último se consideran técnicas como la espectroscopia UV-visible o la resonancia magnética nuclear de pulsos, muy utilizadas en el estudio de transferencias electrónicas entre complejos de transición y proteínas

**Competencias:**

**Competencias transversales/genéricas**

Si se tiene en cuenta que se trata de un curso de postgrado, la superación del mismo requerirá que los alumnos demuestren su aptitud en los siguientes aspectos:

1. Habilidades y destrezas relacionadas con el contenido del curso.

2. Destrezas transversales a otros contextos, por ser de naturaleza general, no necesariamente relacionados con la Química Física.

En relación con el primer apartado, el alumno que supere el curso debe mostrar conocimiento y comprensión de conceptos, principios y teorías relacionados con los procesos de transferencia de carga. Debe tener capacidad para aplicar estos conceptos a la resolución de problemas cualitativos y cuantitativos relacionados con la materia estudiada. Debe, también, proponer medidas experimentales encaminadas a obtener una determinada información.

Con respecto al segundo apartado, entre las destrezas generales debe saber presentar por escrito u oralmente un trabajo. Debe ser capaz de realizar una búsqueda bibliográfica en base de datos y en internet, así como los conocimientos de inglés necesarios para poder leer sin dificultad revistas científicas internacionales. Estos son requisitos generales indispensables para realizar las labores de investigación.

### Competencias específicas

Las competencias específicas a adquirir por el alumno se van a exponer utilizando para ello los descriptores del curso de máster.

Cognitivas (Saber)

- 1.- Tipos de procesos de transferencia de carga.
- 2.- Conceptos teóricos sobre las reacciones de transferencia de carga.
- 3.- Transferencia electrónica en disolventes polares.
- 4.- Transferencia electrónica electroquímica.
- 5.- procesos de transferencia protónica.
- 6.- Tratamiento de reacciones químicas en disolución.
- 7.- Algunos ejemplos prácticos de transferencia electrónica en fase líquida.
- 8.- Técnicas recientes en el estudio de procesos de transferencia de carga.
- 9.- Procesos en sistemas biológicos.

Procedimentales / Instrumentales (Saber hacer)

1. Interpretación de datos experimentales.
2. Propuesta de medidas experimentales que permitan obtener información esencial para la interpretación de datos experimentales.

Actitudinales (Ser)

- 1.- Capacidad de crítica y autocrítica.
- 2.- Capacidad de generar nuevas ideas.
- 3.- Creatividad.
- 4.- Capacidad de análisis y síntesis.
- 5.- Aprendizaje autónomo

### CONTENIDOS DE LA ASIGNATURA

PRIMERA PARTE: Conceptos teóricos y modelos en el tratamiento de los procesos de transferencia de carga.

SEGUNDA PARTE: Procesos de transferencia de carga en medios homogéneos y heterogéneos.

Temario desarrollado

Temario Teórico

PRIMERA PARTE: Conceptos teóricos y modelos en el tratamiento de los procesos de transferencia de carga.

Objetivos y competencias: Se considerarán en esta primera parte los conceptos teóricos y los modelos en relación con los procesos de transferencia de carga. Se partirá de los modelos más sencillos y se verá las limitaciones de los mismos. Posteriormente se estudiarán modelos más elaborados que consideran aspectos complejos de los procesos de transferencia de carga.

1.- Tipos de procesos de transferencia de carga.

Transferencias electrónicas en fases condensadas: Procesos en estado sólido, procesos en fase líquida y procesos en interfases.

Reacciones de transferencia protónica. Transferencia de iones y de grupos atómicos.

2.- Conceptos teóricos sobre las reacciones de transferencia electrónica.

La transferencia electrónica como fenómeno cuántico. Descripción de los estados cuánticos. La aproximación Born-Oppenheimer. El efecto túnel. La regla de oro de Fermi.

3.- Transferencia electrónica en disolventes polares.

Polarizaciones inercial y no inercial del medio: El principio de Franck-Condon. Campos y polarizaciones en dieléctricos. Fluctuaciones en torno al equilibrio en un dieléctrico uniforme. Separación de polarizaciones de alta y baja frecuencia. El Hamiltoniano del sistema reaccionante. Tratamientos adiabático y no adiabático. Efecto del disolvente en la constante de velocidad. La energía de reorganización del disolvente. El papel de las polarizaciones inercial y no inercial en reacciones adiabáticas y no adiabáticas. La región invertida.

4.- Transferencia electrónica electroquímica.

La corriente eléctrica en el caso de reacciones no adiabáticas. Reacciones electroquímicas adiabáticas.

5.- Procesos de transferencia protónica.

La probabilidad de tránsito en la aproximación armónica. La transferencia protónica parcialmente adiabática. Efectos isotópicos: influencia de la distancia.

SEGUNDA PARTE: Procesos de transferencia de carga en medios homogéneos y heterogéneos.

Objetivos y competencias: Se considerarán casos concretos de procesos de transferencia de carga en medios homogéneos y heterogéneos. Se abordará la interpretación de los datos experimentales correspondientes a dichos procesos utilizando diferentes modelos. También se tendrán en cuenta aquellas técnicas más habitualmente utilizadas en la obtención de información sobre procesos de transferencia de carga.

6.- Tratamiento de las reacciones químicas en disolución. Algunos ejemplos prácticos de transferencia electrónica en fase líquida.

Medios homogéneos. Medios microheterogéneos. Ensanchamiento de bandas de resonancia magnética en transferencias electrónicas entre proteínas y complejos de transición.

## ACTIVIDADES FORMATIVAS

### Relación de actividades formativas del primer cuatrimestre

#### *Clases teóricas*

---

**Horas presenciales:** 20.0

**Horas no presenciales:** 80.0

#### **Metodología de enseñanza-aprendizaje:**

Sesiones académicas teóricas. Exposición y debate. Tutorías especializadas.

#### **Competencias que desarrolla:**

Las figuras que aparecerán proyectadas durante las clases serán proporcionadas por el profesor a los alumnos con anterioridad a la exposición. Así mismo, se les proporcionarán algunos de los artículos de investigación más relevantes. Dado que se trata de un curso de máster, el profesor expondrá aquellos aspectos teóricos más relevantes y en clases posteriores, considerando datos experimentales de la bibliografía, se discutirá la posibilidad de aplicar los distintos modelos vigentes a los mismos. Se discutirán las distinta forma que tienen diferentes autores de abordar los mismos problemas, así como aquellos aspectos de la discusión de resultados realizadas en varios artículos que nos susciten dudas. Estas clases están principalmente orientadas al debate profesor-alumnos, con la idea de desarrollar en estos la capacidad de aplicar los conocimientos adquiridos a casos prácticos. Este es un aspecto fundamental para alumnos que van a desarrollar una amplia labor investigadora durante una posible realización de su tesis Doctoral.

### Relación de actividades formativas del segundo cuatrimestre

#### *Clases teóricas*

---

**Horas presenciales:** 0.0

**Horas no presenciales:** 0.0

## SISTEMAS Y CRITERIOS DE EVALUACIÓN Y CALIFICACIÓN

#### *Sistema de evaluación continua*

---

La evaluación y consiguiente calificación del trabajo de los alumnos se llevará a cabo mediante un sistema de evaluación continua. El pequeño número de alumnos que asisten a los cursos de máster permite llevar a cabo este tipo de evaluación. Esta evaluación continua se basará en la participación de los alumnos en los debates realizados durante el curso, en el resultado de las búsquedas bibliográficas que tendrán que llevar a cabo, en la iniciativa mostrada a la hora de interpretar datos experimentales y proponer nuevas experiencias que pudieran proporcionar información adicional,...etc.

#### *Examen Final*

---

Si no se pudiera evaluar a un alumno de forma continuada durante el desarrollo del curso o esta evaluación resultara negativa, el alumno podrá presentarse a un examen teórico en una única convocatoria.