

DATOS DE LA ASIGNATURA

Denominación:	Química Inorgánica Aplicada		Código:	57242	
Clase:	Optativa		Curso:	5º	
Carácter:	Cuatrimestral		Cuatrimestre:	1º	
Créditos LRU:	6	Teóricos:	4,5	Prácticos:	1,5
Créditos ECTS:	5,5	Horas totales asignatura:		137,5	
Descriptor(es): (BOE)	Compuestos inorgánicos como materiales de interés en la industria química. Aplicaciones y métodos de caracterización.				

Departamento:

Área de conocimiento:

PROFESORADO

	Nombre	Ubicación	Horario tutorías
Responsable(s):	Blanca R. Manzano	1ª planta	L, X, J de 16.30 a 18.30 h.
Otros:	Mª del Carmen Carrión		

PLANIFICACIÓN DOCENTE

1. OBJETIVOS DE LA ASIGNATURA

- Comprensión de los fundamentos, información que suministran y las aplicaciones de las principales técnicas de caracterización de sólidos (de difracción, microscopía y espectroscópicas), incluidas las de caracterización de superficies.
- Interpretación de resultados experimentales relativos a caracterización de sólidos.
- Desarrollo de la capacidad para elegir la técnica o técnicas más adecuadas para caracterizar un sólido o una superficie.
- Comprensión de los fundamentos de la catálisis heterogénea, estructura de superficies y adsorción en superficies sólidas, así como de algunos procesos importantes.
- Comprensión de los conceptos clave de Q. Supramolecular, de complejación de cationes y aniones así como de diversos tipos de estructuras supramoleculares.
- Capacitar al alumno para buscar la bibliografía adecuada para conseguir información para un determinado tema.

2. COMPETENCIAS Y DESTREZAS TEÓRICO-PRÁCTICAS A ADQUIRIR POR EL ALUMNO

- Capacidad de análisis y síntesis para desarrollar un determinado tema buscando en las fuentes bibliográficas adecuadas.
- Capacidad para desarrollar un trabajo en grupo.
- Capacidad para expresarse por escrito con total corrección.
- Conocimiento de los medios informáticos adecuados para exponer con claridad un determinado tema.
- Adquisición de las habilidades adecuadas para exponer oralmente con claridad y amenidad un tema.
- Resolución de problemas.
- Capacidad de organización y planificación.
- Razonamiento crítico.
- Manejo, a nivel elemental, del programa "Mercury" para estructuras determinadas por difracción de rayos X.

3. TEMARIO TEÓRICO-PRÁCTICO

Técnicas de caracterización de sólidos

1.- Métodos de difracción y de microscopía electrónica. Difracción de rayos X de polvo y de monocristal. Difractogramas. Difracción de electrones. Difracción de neutrones. Microscopía electrónica de transmisión (SEM), de barrido (TEM), de efecto túnel y de fuerza atómica. Microscopía electrónica analítica (AEM).

2.- Métodos espectroscópicos. Espectroscopia fotoelectrónica de rayos X (XPS). Fundamentos. Aplicaciones. Espectroscopia fotoelectrónica ultravioleta (UPS). Espectroscopia electrónica Auger (AES). Espectroscopia XANES. EXAFS. Otros métodos.

Catálisis heterogénea

3.- Principios básicos de la catálisis. Clasificación de los sistemas catalíticos. Clasificación de los catalizadores sólidos. Aspectos cuantitativos.

4.- Catálisis en superficies. Estructura de las superficies. Superficies en sólidos cristalinos y amorfos. Adsorción. Geometría de la adsorción. Notación de Wood.

5.- Selección de un catalizador. Criterios. Composición y manufactura de catalizadores industriales. Catalizadores soportados.

6.- Procesos de catálisis heterogénea de interés. Oxidación de CO en Pd. Síntesis de amoníaco. Catalizadores bifuncionales y reformado de hidrocarburos. Síntesis de metanol. Catalizadores para los gases de escape de los automóviles. Catálisis Fischer-Tropsch.

7.- Catálisis en cavidades. Zeolitas. Estructura y clasificación. Síntesis y caracterización. Propiedades. Acidez. Adsorción y difusión en zeolitas. Selectividad de forma. Procesos catalíticos en zeolitas.

Química Inorgánica Supramolecular.

8.- Definición. Clasificación de los compuestos supramoleculares. Efecto quelato y macrociclo. Selectividad cinética y termodinámica. Naturaleza de las interacciones supramoleculares. Complejación de cationes. Interacción de aniones. Autoensamblado en compuestos de coordinación. Catenanos y rotaxanos. Helicatos. Ingenios moleculares.

4. DISTRIBUCIÓN DE ACTIVIDADES

	H O R A S			
	Tiempo presencial	Factor aplicable	Tiempo personal	TOTAL
Clases magistrales	30	2	60	90
Laboratorio	5	0	0	5
Tutoría obligatoria	1	0	0	1
Seminario / talleres	7	1	7	14
Trabajo individual	0	0	0	0
Evaluaciones continuas	2	2,5	5	7
Exámenes periodos establecidos	6	2,5	15	21
Tiempos totales	51		87	138

5. PLANIFICACIÓN TEMPORAL

Códigos para las tareas: C = clase magistral; L = laboratorio; T = tutoría; S = seminario; TI = trabajo individual; E = evaluaciones continuas; EX = examen.

(Indíquese los meses en la primera fila)

Septiembre					Octubre				Noviembre				Diciembre					
					C	C	C	S+C			C/T	E	L					L
							C	S+C+C	C	C								L
C	C	C	S		C	C	C	S		C			L		C	C	C	L
C	C	C	S		C	C	C	S	C	C			S					
									C	C								
Sumas parciales: C = 6 S = 2 L = 0 T = 0 TI = 0 E = 0 EX = 0					Sumas parciales: C = 13 S = 4 L = 0 T = 0 TI = 0 E = 0 EX = 0				Sumas parciales: C = 8 S = 1 L = 2 T = 1 TI = 0 E = 0 EX = 1				Sumas parciales: C = 3 S = 0 L = 3 T = 0 TI = 0 E = 0 EX = 0					

6. METODOLOGÍA DOCENTE

- Clases magistrales, especialmente para los conceptos más complejos.
- Resolución de problemas, entregados previamente al alumno, en clases de seminarios. La resolución por parte del alumno formará parte de la evaluación.
- Planteamiento por parte del alumno de problemas en relación a contenidos ya vistos.
- Resolución en clase, por grupos, de problemas.
- Preparación, por parte del alumno, de forma individual o en grupos, de trabajos cortos buscando la bibliografía adecuada.
- Exposición de trabajos en clase.
- Tutorías personalizadas o en grupo.
- Potenciación de la participación en clase con preguntas relativas a los temas.
- Visita a laboratorios con aparatos relacionados con las técnicas vistas en clase.
- Uso del programa Mercury en la sala de ordenadores trabajando con estructuras resueltas por difracción de rayos X.
- Realización de algunos exámenes a lo largo del curso, además del final.

7. CRITERIOS DE EVALUACIÓN

- Participación activa en clase, en los seminarios y en las tutorías.
 - Participación en la propuesta de nuevos problemas.
 - Trabajo corto realizado por el alumno individual o en grupo, incluyendo el seguimiento del desarrollo del mismo.
 - Exámen parcial eliminatorio y final.
- La participación en seminarios y otras actividades será el 25% de la nota. Para hacer media, en los exámenes ha de sacarse más de 4.

8. BIBLIOGRAFÍA

8.1. BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

- "Solid State Chemistry" A. K. Cheetham, P. Day, Oxford Science Publications, (1991)
- "Principles and Practice of Heterogeneous Catalysis" J. M. Thomas, W. J. Thomas, VCH, (1997).
- "Catalytic Chemistry" B. C. Gates, Wiley (1992).
- "Supramolecular Chemistry" J. W. Steed, J. L. Atwood, Wiley (2002). "Heterogeneous Catalysis" G. C. Bond, Oxford Science Publications, (1987).
- "Introducción a la Ciencia de materiales. Técnicas de preparación y caracterización". J. M. Albella, A. M. Cintas, T. Miranda, J. M. Serratosa, CSIC, Madrid, 1993.
- "Química de coordinación" J. Ribas Gispert, Ediciones Omega, (2000).

8.2. BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

- "Fundamentos de la Ciencia e Ingeniería de Materiales". W.F. Smith. McGraw- Hill (1994).
- "Introducción a la Ciencia e Ingeniería de los Materiales". W. D. Callister, Jr., Ed. Reverté (1995).
- "Basic Solid Chemistry". A. R. West. Ed. Wiley (1988).
- "Applied Heterogeneous Catalysis" J. F. Le Page, Institut Français du pétrole publications, Editions Technip (1987).
- "Heterogeneous Catalysis" M. G. White, Prentice Hall (1990).
- "An Introduction to Zeolite Molecular Sieves". A. Dyer. Ed., John Wiley (1988).
- "Encyclopedia of Supramolecular Chemistry" J. L. Atwood, J. W. Steed Eds. Marcel Dekker, (2004).