



1. Información de la Unidad de Aprendizaje:

Nombre: Temas selectos en Electroquímica I		Número de créditos: 9	
Departamento: Química		Horas B.C.A. **: 64	Horas A.M.I.***: 80
Total de horas: 144			
Tipo *: C	Prerrequisitos: Ninguno	Nivel: Formación Optativa Abierta	

\* C=Curso, S=Seminario, CT=Curso Taller, T=Taller, L=Laboratorio, N=Clínica

\*\*B.C.A. Bajo conducción académica.

\*\*\*A.M.I. Actividades de manera independiente

2. Descripción

*El curso está orientado a la aplicación de las nuevas teorías de predicción de reactividad química como DFT, el aprendizaje de software para la predicción y validación de mecanismos de reacción, el estudio de la interacción de la luz con electrodos semiconductores y la comprensión de celdas biológicas de interconversión de energía. El curso está relacionado a los cursos que química cuántica, fisicoquímica y química orgánica.*

3. Objetivo general

*El estudiante será capaz de conocer y aplicar técnicas modernas de predicción de cinética, como la teoría cinética moderna de Marcus, conocerá y aplicará conceptos de química cuántica, e.g., DFT y el modelado mecanismos de reacción mediante el manejo de programas de cómputo comerciales como DigiSIM y KISSA-1D©.*

4. Contenido temático

UNIDAD 1.	
Objetivo específico: Discutir las nuevas teorías de cinética molecular y la predicción de mecanismos de reacción electroquímicos.	
1. Teoría cinética molecular 1.1 Teoría electrocinética molecular de Marcus 1.2 Orbitales moleculares en electroquímica 1.3 Predicción de mecanismos de reacción electroquímicos 1.4 Aplicaciones	Nº Sesiones:5 horas/semana: 4
UNIDAD 2.	
Establecer las bases y formulación mecánico cuántica de sistemas electroquímicos y la aplicación de métodos de DFT.	
2. Electroquímica orientada cuánticamente 2.1 Formulación mecánico cuántica de la electroquímica	Nº Sesiones:4 horas/semana:8

--	--

UNIDAD 3.	
Aprender el manejo y aplicación de los programas de simulación molecular para el esclarecimiento de mecanismos de reacción complejos, el cálculo de reactividad basados en DFT y plasmones superficiales.	
3. Simulación digital de problemas electroquímicos 3.1 Introducción al software utilizado para simulación molecular 3.2 Simulación de sistemas electroquímicos 3.3 Cálculos mecánico cuánticos basados en DFT 3.4 Funciones de Fukui 3.5 Estudios de plasmones superficiales 3.6 Aplicaciones	N° Sesiones:6 horas/semana:4

UNIDAD 4.	
Discutir los métodos más comunes de caracterización de reacciones en electrodos semiconductores y su interacción con luz láser o radiación sincrotrónica.	
4. Fotoelectroquímica 4.1 Electrodos semiconductores 4.2 Fotoelectrocatalisis 4.3 Aplicaciones	N° Sesiones:6 horas/semana: 4

UNIDAD 5.	
Aprender el funcionamiento de las celdas electroquímicas en sistemas biológicos naturales y el estudio de los procesos de almacenamiento e interconversión de energía en el metabolismo de organismos vivos.	
5. Bioelectroquímica 5.1 Celdas biológicas y sus membranas 5.2 Modelos de transferencia de electrones a y de proteínas en contacto con la solución 5.3 Bioenergética y metabolismo 5.4 Electroquímica de $\text{NAD}^+$ y $\text{NADH}$ 5.5 Aplicaciones	N° Sesiones:5 horas/semana:4

UNIDAD 6.	
Discutir temáticas que ayuden al estudiante en proyectos específicos de electroquímica, motivando la lectura especializada y la discusión conjunta con el profesor.	
Temas selectos I	N° Sesiones:3 horas/semana: 4

UNIDAD 7.	
Discutir temas que ayuden al estudiante en sus proyectos específicos de electroquímica, motivando la lectura especializada y la discusión conjunta con el profesor.	
Temas selectos II	N° Sesiones:3 horas/semana:4

#### 5. Modalidades de enseñanza aprendizaje

La modalidad del proceso de enseñanza-aprendizaje incluye:

- Exposición oral de parte del profesor con apoyo de material audiovisual.
- Resolución de ejercicios en clase
- Asignación y resolución de tareas
- Lectura y discusión de artículos científicos de los temas desarrollados en clase.
- La revisión de videos y tutoriales en internet relacionados con temas de interés.
- La escritura de un artículo de revisión al final del curso de un tópico elegido por el estudiante
- Desarrollo de un proyecto final o redacción de un artículo de revisión

#### 6. Modalidad de evaluación

Evaluación continua:

Mecanismo	Porcentaje
Exámenes parcial y final	60
Tareas	30
Lectura de artículos y revisión de videos	10
Exámenes parcial y final	60

#### 7. Bibliografía

Título	Autor	Editorial, fecha	Año de la edición más reciente
Organic Electrochemistry	Ole Hammerich y Bernd Speiser	CRC Press	2016
Fundamentals and applications of organic electrochemistry	Toshio Fuchigami, Shinsuke Inagi, Mahito Atobe	John Wiley and Sons	2015
Modern Aspects of Electrochemistry. Applications of Electrochemistry and nanotechnology in biology and Medicine II	Noam Elias	Springer	2012
Organic Electrochemistry	Henning Lund, Manuel M Baizer	Marcel-Dekker	2001
Electrochemical Reactions and Mechanisms in Organic Chemistry	James Grimshaw	Elsevier	2000
Laboratory Techniques in Electroanalytical Chemistry	Peter T. Kissinger and William R. Heineman	Marcel Dekker, Inc. NY (1996).	1996
Electrochemistry in organic synthesis	Dr. JiH Volke	Springer-Verlag	1994
Surface Electrochemistry A Molecular level Approach	John O'M Bockris and Shahed U. M. Khan	Plenum press, NY and London (1993).	1993
Surface Electrochemistry A Molecular level Approach	John O'M Bockris and Shahed U. M. Khan	Plenum press, NY and London	1993

		(1993).	
Laboratory Techniques in Electroanalytical Chemistry	Peter T. Kissinger and William R. Heineman	Marcel Dekker, Inc. NY (1996).	1996

## 8. Otros materiales de apoyo

### Videos en internet

- DFT <https://www.youtube.com/watch?v=jZi2EOrcrpY>
- Introduction to DFT <https://www.youtube.com/watch?v=Whf6melBldg&t=2261s>
- Short demo of digisim <https://www.youtube.com/watch?v=zr16gMPaoL8>
- KISSA-1D© Electrochemical Simulation Tutorial: Adsorption <https://www.youtube.com/watch?v=dMTEtJTTEGM>
- MECSim Tutorial 1: Getting Started [https://www.youtube.com/watch?v=R2okiRWVG\\_s](https://www.youtube.com/watch?v=R2okiRWVG_s)

### Artículos científicos especializados

#### Computational electrochemistry: prediction of liquid-phase reduction potentials

Aleksandr V. Marenich, Junming Ho, Michelle L. Coote, Christopher J. Cramer and Donald G. Truhlar Phys. Chem. Chem. Phys., 2014, 16, 15068

DFT Study on the Mechanism of the Electrochemical Reduction of CO<sub>2</sub> Catalyzed by Cobalt Porphyrins, Jing Shen, Manuel J. Kolb, Adrien J. Göttle, and Marc T. M. Koper\* J. Phys. Chem. C 2016, 120, 15714–15721

Conceptual Surface Electrochemistry and New Redox Descriptors, J.-S. Filhol, and M.-L. Doublet, J. Phys. Chem. C 2014, 118, 19023–19031.

DFT Study on the Mechanism of the Electrochemical Reduction of CO<sub>2</sub> Catalyzed by Cobalt Porphyrins, Jing Shen, Manuel J. Kolb, Adrien J. Göttle, and Marc T. M. Koper J. Phys. Chem. C 2016, 120, 15714–15721.

Biochemistry and Theory of Proton-Coupled Electron Transfer, Agostino Migliore, Nicholas F. Polizzi, Michael J. Therien, and David N. Beratan, 4 | Chem. Rev. 2014, 114, 3381–3465.

## 9. Conocimientos aptitudes y capacidades que el alumno deberá adquirir

El estudiante será capaz de predecir reactividad química, planteará mecanismos orgánicos complejos y los valorará mediante el uso de programas de simulación molecular.

## 10. Perfil académico sugerido para el docente

Un académico con conocimientos de electroquímica, técnicas de cómputo por DFT para la predicción de reactividad y manejo de programas como DiGISIM o KISSA-1D© para el estudio de mecanismos de reacción electroquímicos.

## 11. Autores

*Dr. Norberto Casillas Santana*

Formato basado en el Artículo 21 del Reglamento General de planes de estudios de la U.de G.