



Ministerio de Cultura y Educación
Universidad Nacional de San Luis
Facultad de Química Bioquímica y Farmacia
Departamento: Química
Área: Química Física

(Programa del año 2017)

I - Oferta Académica

Materia	Carrera	Plan	Año	Período
(OPTATIVA (L.Q. 3/11)) AVANCES EN CINÉTICA QUÍMICA	LIC. EN QUIMICA	3/11	2017	2° cuatrimestre

II - Equipo Docente

Docente	Función	Cargo	Dedicación
GASULL, ESTELA ISABEL	Prof. Responsable	P.Tit. Exc	40 Hs
SANCHO, MATIAS ISRAEL	Prof. Colaborador	P.Adj Exc	40 Hs
ALMANDOZ, MARIA CRISTINA	Prof. Co-Responsable	P.Asoc Exc	40 Hs

III - Características del Curso

Credito Horario Semanal				
Teórico/Práctico	Teóricas	Prácticas de Aula	Práct. de lab/ camp/ Resid/ PIP, etc.	Total
2 Hs	Hs	Hs	3 Hs	5 Hs

Tipificación	Periodo
B - Teoría con prácticas de aula y laboratorio	2° Cuatrimestre

Duración			
Desde	Hasta	Cantidad de Semanas	Cantidad de Horas
04/09/2017	10/11/2017	10	50

IV - Fundamentación

Este Curso Optativo tiene como finalidad específica el enriquecimiento de la formación fisicoquímica general de los Alumnos de la Licenciatura en Química y en particular, de Cinética Química. El desarrollo de las unidades teórico-experimentales propuestas incrementan la pericia de los estudiantes en la resolución de asuntos vinculados con la Cinética de Reacción, y que deberán resolver en su futuro quehacer profesional. El conocimiento de modernos procedimientos científicos y operativos de Cinética Química, facilitará la interpretación de datos experimentales por parte de los Alumnos y consecuentemente, la búsqueda de soluciones para problemas de naturaleza interdisciplinarios.

V - Objetivos / Resultados de Aprendizaje

Utilizando una metodología de enseñanza teórico-práctica, favorecer el correcto análisis de datos cinéticos experimentales. Asimismo, que los Alumnos comprendan cómo se establecen los probables mecanismos de reacción. Con estos fines se propone: a) la resolución de problemas de aplicación de dificultad creciente y la utilización de variados métodos gráficos y numéricos en el análisis de los resultados; b) el estudio de sistemas químicos y biológicos descritos en la literatura científica, que ilustran variadas técnicas gráficas y numéricas de aplicación actual en Cinética Química; c) la realización de trabajos prácticos de laboratorio. La tarea experimental comprenderá la determinación del orden de reacción y el análisis del efecto de fuerza iónica, disolvente, temperatura y pH sobre la velocidad de reacción de un determinado sistema químico, para finalmente proponer un probable mecanismo de reacción.

VI - Contenidos

Tema 1. VELOCIDAD DE REACCIONES QUÍMICAS.

Cinética química empírica. Técnicas experimentales de análisis. Análisis en tiempo real. Métodos de flujo y de pulso. Reacciones próximas al equilibrio. Método de relajación. Leyes y constantes de velocidad. Leyes de velocidad integradas. Problemas de aplicación.

Tema 2. INTERPRETACIÓN DE LAS LEYES DE VELOCIDAD.

Reacciones elementales. Reacciones opuestas, laterales y sucesivas de gran complejidad. Simulación de procesos cinéticos. Tratamiento de datos con métodos exactos y aproximados. Efecto isotópico primario y secundario. Dependencia de la velocidad de reacción con la temperatura: Ecuaciones de Arrhenius y de Eyring. Problemas numéricos y aplicativos en Biología, materiales y medio ambiente.

Tema 3. REACCIONES EN CADENA. CATALISIS.

Reacciones en cadena: gaseosas y en solución. Ejemplos. Catálisis homogénea química y biológica. Catálisis ácido-base específica y general: Mecanismos. Perfiles de pH y estabilidad química. Problemas de aplicación.

Tema 4. APLICACIONES. ELUCIDACION DE MECANISMOS DE REACCIÓN.

Reacciones de ciclización y de apertura de anillo. Mecanismo de interconversión en medio alcalino de 4'-metoxiflavanona y 2'-hidroxi-4-metoxichalcona. Complejación de iones metálicos. Mecanismo de la reacción de complejación de tricloruro de aluminio con o-hidroxibenzofenona. Conclusiones.

VII - Plan de Trabajos Prácticos

NORMAS BÁSICAS DE SEGURIDAD

Antes de comenzar con el primer trabajo práctico, el Jefe de Trabajos Prácticos responsable de cada grupo, instruirá a los alumnos acerca de las normas de seguridad en el laboratorio. Además, la Guía de Trabajos Prácticos de Laboratorio incluye un cuadernillo con las Normas Básicas de Seguridad en Laboratorios, donde se explicitan los siguientes puntos:

- * Elementos de seguridad en el laboratorio
- * Equipos de protección personal
- * Normas higiénicas y condiciones generales de trabajo
- * Manipuleo del material de vidrio
- * Manipuleo de productos químicos
- * Condiciones básicas para la realización de experimentos
- * Mantenimiento y limpieza del laboratorio
- * Prevención de incendios
- * Eliminación de residuos
- * Acciones a seguir en casos de emergencia

A). TRABAJOS PRÁCTICOS EXPERIMENTALES.

Sistema a estudiar:

- * Reducción del azul de metileno por ácido ascórbico

El estudio cinético la reacción se realizará en 6 (seis) jornadas de laboratorio, con la finalidad de determinar:

- a) Orden de reacción
- b) Influencia del catalizador sobre la velocidad de reacción
- c) Influencia de la fuerza iónica sobre la velocidad de reacción
- d) Efecto solvente sobre la velocidad de reacción
- e) Efecto de la temperatura sobre la velocidad de reacción
- f) Trabajar en la propuesta de un mecanismo de reacción

B). TRABAJOS PRÁCTICOS DE AULA.

B.1. Resolución de problemas (analíticos y numéricos) de interés químico y biológico, con el objetivo de que los Alumnos:

- * Observen características esenciales de los métodos cinéticos experimentales.
- * Comprendan y realicen el ajuste de datos experimentales con diversas expresiones analíticas de velocidad.

- * Utilicen los efectos isotópicos primario y secundario en la elucidación de mecanismos de reacción.
- * Propongan mecanismos de reacción y obtengan las expresiones de velocidad correspondientes.

VIII - Regimen de Aprobación

RÉGIMEN PARA ALUMNOS REGULARES

1. Inscripción: podrán inscribirse y cursar como regulares los alumnos que hayan regularizado Química-Física II y Química Orgánica II.
2. Trabajos Prácticos: la asistencia a trabajos prácticos es obligatoria.
Para regularizar el curso los alumnos deberán cumplir con los siguientes requisitos:
 - a) Haber asistido al 70% de las clases Teórico-Prácticas.
 - b) Haber realizado la totalidad de los Trabajos Prácticos de Laboratorio.
3. Examinaciones parciales y recuperaciones: se tomará un parcial escrito sobre los Trabajos Prácticos. Podrán rendir el examen parcial aquellos alumnos que hayan realizado los Trabajos Prácticos de Laboratorio y Aula. El parcial tendrá una recuperación, a la cual se podrá acceder luego de haber cumplido con los puntos 2 y 4.
4. Presentación de un Informe relacionado con el análisis de un Trabajo de Investigación, al cual se le asignará una nota de aprobación. La nota de aprobación de las evaluaciones no podrá ser inferior a seis.
5. Examen final: El alumno que alcance la regularidad deberá aprobar un examen final oral en un turno de examen habilitado por la Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia.
6. Los alumnos que no alcancen la regularidad podrán rendir en condición de libres.

RÉGIMEN PARA ALUMNOS PROMOCIONALES

1. Inscripción: podrán cursar por el régimen promocional los alumnos que hayan aprobado las asignaturas Química-Física II y Química Orgánica II.
2. Los alumnos deben haber asistido al 80% de las Clases Teórico-prácticas y haber realizado la totalidad de los Trabajos Prácticos de Laboratorio.
3. Examinaciones parciales y recuperaciones: se tomará un parcial escrito sobre los Trabajos Prácticos y un parcial de Teoría. Podrán rendir los exámenes parciales aquellos alumnos que hayan realizado los Trabajos Prácticos de Laboratorio y Aula. Los parciales tendrán una recuperación, a la cual se podrá acceder luego de haber cumplido con los puntos 2 y 4.
4. Presentación de un Informe relacionado con el análisis de un Trabajo de Investigación, al cual se le asignará una nota de aprobación. La nota de aprobación de las evaluaciones no podrá ser inferior a siete.
5. Pérdida de la promoción: en caso de no cumplir con algunas de las condiciones establecidas para el régimen de promoción, el alumno pasará automáticamente a la condición de regular.
6. Nota final: la calificación final será el promedio de las evaluaciones parciales y de una nota conceptual del desempeño general del alumno en la asignatura.

IX - Bibliografía Básica

- [1] 'Organic Reactions. Equilibria, Kinetics and Mechanism'. F. Ruff and I.G. Csizmadia. Elsevier, London, 1994.
- [2] 'Química-Física'. P. W. Atkins. 8ª ed., Editorial Médica Panamericana, Argentina, 2008.
- [3] 'Chemical Kinetics'. Keith J. Laidler. 3rd ed. Harper-Collins. NY, 1987.
- [4] 'Fisicoquímica'. K.J. Laidler, J.H. Meiser. Compañía Editorial Continental, 2003.
- [5] 'Mechanism in Organic Chemistry'. P. Sykes, Longman, England, 1997.
- [6] 'Physical Organic Chemistry'. 2nd ed., N. Isaacs, Longman, England, 1995.
- [7] Isomerization of 4-methoxyflavanone in alkaline medium. Determination of the enolate formation constant. J. Molec. Struct. (Theochem), 636, 157-166, 2003.
- [8] An experimental and theoretical study of the complexation mechanism of Al(III) with 2-hydroxy-4-methoxy-benzophenone. Chemistry Physical: An Indian Journal, 1, 32-40, 2006.
- [9] The kinetics and mechanisms of the reactions of iron(III) with quercetin and morin. J. Inorg. Biochem. 102, 127-136, 2008.
- [10] A Simple algorithm for the distinction of reaction mechanisms based on the measurement of additive properties. J. Chem. Educ., 73(3), 214-216, 2001.
- [11] Stability and chemical reactivity of 7-isopropoxyisoflavone (Ipriflavone). Eur.J. Org. Chem., 3911-3920, 2001.
- [12] Kinetic solvent isotope effect: a simple, multipurpose physical chemistry experiment. J. Chem. Educ., 74(5), 562-565, 1997.

[13] Spectrophotometric investigation of the complexation mechanism of Al(III) by 2,4-dihydroxy-acetophenone. Spectrochim. Acta A, 77, 51-58, 2010.

[14] OTROS

[15] Guías de Trabajo Prácticos de Laboratorio y Aula de la Cátedra

X - Bibliografía Complementaria

[1] Effects of the solvent and temperature on the 2:1 catechol-Al(III)-complex. Spectrochim. Acta A, 68, 387-393, 2007.

[2] Identification of the Products of Oxidation of Quercetin by Air Oxygen at Ambient Temperature. Molecules, 12, 654-672, 2007.

[3] Kinetic investigation of aquation of some Fe(II) Schiff base amino acid complexes. Int. J. Chem. Kinet., 372-379, 2010.

[4] Mechanism of oxidation of alanine by chloroaurate(III) complexes in acid medium: Kinetic of the rate processes. Int. J. Chem. Kinet., 473-481, 2010.

[5] Kinetic of the mercury(II)-catalyzed substitution of coordinated cyanide ion in hexacyanoruthenate(II) by nitroso-R-salt. Int. J. Chem. Kinet., 215-226, 2010.

XI - Resumen de Objetivos

Utilizar el crédito horario asignado, distribuido en clases teóricas-prácticas y prácticos de laboratorio para desarrollar los temas que lo componen, los cuales comprenden principalmente los fundamentos de la Cinética de Reacción y sus aplicaciones en diversos sistemas químicos y biológicos. Su objetivo primordial es aplicar las leyes básicas que permiten explicar la ocurrencia de las reacciones químicas y analizar los mecanismos por los cuales se verifican.

XII - Resumen del Programa

Tema 1. VELOCIDAD DE REACCIONES QUÍMICAS.

Cinética química empírica. Técnicas experimentales de análisis. Reacciones próximas al equilibrio. Problemas de aplicación.

Tema 2. INTERPRETACIÓN DE LAS LEYES DE VELOCIDAD.

Reacciones elementales. Reacciones opuestas, laterales y sucesivas de gran complejidad. Simulación de procesos cinéticos.

Efecto isotópico primario y secundario. Dependencia de la velocidad de reacción con la temperatura. Problemas numéricos y aplicativos en Biología, materiales y medio ambiente.

Tema 3. REACCIONES EN CADENA. CATALISIS.

Reacciones en cadena: gaseosas y en solución. Catálisis homogénea química y biológica. Perfiles de pH y estabilidad química. Problemas de aplicación.

Tema 4. APLICACIONES. ELUCIDACION DE MECANISMOS DE REACCIÓN.

Reacciones de ciclización y de apertura de anillo. Complejación de iones metálicos.

XIII - Imprevistos

XIV - Otros