Ministerio de Cultura y Educación **(Programa del año 2010)**
Universidad Nacional de San Luis
Facultad de Química Bioquímica y Farmacia
Departamento: Quimica
Area: Quimica Fisica

I - Oferta Académica

Materia	Carrera	Plan	Año	Período
QUIMICA FISICA II	LIC. EN QUIMICA	5/04	2010	2° cuatrimestre

II - Equipo Docente

Docente	Función	Cargo	Dedicación
BLANCO, SONIA ENCARNACION	Prof. Responsable	P.Tit. Exc	40 Hs
GASULL, ESTELA ISABEL	Prof. Colaborador	P.Adj Exc	40 Hs
MASUELLI, MARTIN ALBERTO	Responsable de Práctico	JTP Exc	40 Hs
SANCHO, MATIAS ISRAEL	Responsable de Práctico	A.1ra Semi	20 Hs

III - Características del Curso

Credito Horario Semanal				
Teórico/Práctico	**Teóricas**	**Prácticas de Aula**	**Práct. de lab/ camp/ Resid/ PIP, etc.**	**Total**
Hs	3 Hs	4 Hs	3 Hs	10 Hs

Tipificación	Periodo
B - Teoria con prácticas de aula y laboratorio	2º Cuatrimestre

Duración			
Desde	**Hasta**	**Cantidad de Semanas**	**Cantidad de Horas**
09/08/2010	15/11/2010	14	140

IV - Fundamentación

Para que los futuros profesionales químicos puedan poseer todos los recursos y habilidades que se infieren desde las incumbencias especificadas para la Carrera de Licenciatura en Química, es claro que los estudiantes deben conocer y aprender diversos temas de naturaleza básica y aplicada. Entre ellos, son de importancia los que involucran conocimientos y leyes básicas que explican la ocurrencia de reacciones químicas y los mecanismos por los cuales tienen lugar. También debe destacarse la relevancia del uso de procedimientos teóricos y prácticos fundamentales de la Química Física Aplicada en general y de la Cinética de Reacción en particular, en la resolución de problemas propios de la Química. Los mencionados precedentemente, son los temas que esencialmente se enseñan en Química-Física II.

V - Objetivos / Resultados de Aprendizaje

Utilizando una metodología de enseñanza teórico y práctica, lograr que los Alumnos aprendan de forma amena y fácil, lo siguiente: a) Cuáles son los principales factores operativos involucrados en experimentos cinéticos; b) Cómo se formulan las ecuaciones empíricas de velocidad; c) De qué manera las teorías de velocidad más comunes ayudan a comprender y justificar la ocurrencia de las mismas; d) Cómo se establecen y cómo se analizan los mecanismos de reacción, en sistemas homogéneos y heterogéneos, químicos y biológicos. De este modo, se proporciona a los Alumnos, diversos conocimientos y herramientas útiles para el desarrollo de Asignaturas profesionales posteriores, los cuales están estrechamente vinculados con las incumbencias específicas de la Carrera de Licenciatura en Química.

VI - Contenidos

Tema 1. CINETICA DE REACCIONES ELEMENTALES.

Principios Básicos de Cinética de Reacción. Constante de velocidad específica. Molecularidad. Ejemplos de reacciones uni, bi y trimoleculares. La Ecuación de Velocidad Integrada. Orden de reacción. Orden de reacción verdadero y orden de reacción respecto del tiempo. Reacciones irreversibles de primer y segundo orden. Ecuaciones Cinéticas Simplificadas de Seudo-Orden. Problemas de aplicación.

Tema 2. DETERMINACION NUMERICA DEL ORDEN Y CONSTANTE DE VELOCIDAD.

Orden de Reacción desde Ecuaciones Diferenciales de Velocidad. Derivación gráfica y analítica. Análisis de Datos: velocidades iniciales, series del tiempo y vida media. Solvólisis del bromuro de t-butilo. Medidas Experimentales. Análisis de reacciones de primer y segundo orden usando mediciones espectrofotométricas, conductimétricas y polarimétricas. Formación de complejos metálicos con o-hidroxi-benzofenonas. Problemas de aplicación.

Tema 3. CINETICA DE REACCIONES COMPLEJAS.

Reacciones Reversibles. Reacción con un sólo reactivo y un producto único. Reacción con un sólo reactivo y dos productos. Reacciones Paralelas. Casos de dos y tres reacciones laterales. Reacciones Consecutivas. Ecuaciones de velocidad. Métodos Aproximados para el Tratamiento de Reacciones Complejas. Nitración aromática en medio sulfúrico. Aproximación del pre-equilibrio. Aproximación del estado estacionario. Conclusiones

Tema 4. TEORIAS DE REACCIONES QUIMICAS.

Influencia de la temperatura sobre equilibrios químicos y velocidades de reacción. Ley de Arrhenius: el complejo activado y la energía de activación. Teoría de la Colisión. Teoría del Estado de Transición. Estructura de complejos activados. Entropías y entalpías de activación. Reacción bimolecular entre el yodo y el hidrógeno: aplicación de ambas teorías, conclusiones. Presión y Velocidad de Reacción. Volumen de activación de reacciones orgánicas. Problemas de aplicación.

Tema 5. EFECTOS DEL MEDIO DE REACCION.

La Estructura de Líquidos. Solventes próticos y apróticos, dipolares y apolares. Solvatación. Regiones cibotácticas. Hidratación de iones. Efectos solvente en cinética química y equilibrios químicos. Efectos Solvente sobre Velocidades Específicas. lnteracciones electrostáticas y no electrostáticas, factores de frecuencia y carga de los iones reactivos. Análisis de la influencia del solvente mediante la teoría de Eyring. Factores de frecuencia, entropía de activación y efecto de electro-restricción. Influencia de la fuerza iónica: ecuación de Brönsted-Bjerrum, gráficos log k vs. fuerza iónica, desviaciones. Reacciones que involucran dipolos: efecto del solvente, expresión de Kirkwood, desviaciones. Problemas de aplicación.

Tema 6. MECANISMOS. CATALISIS HOMOGENEA.

Mecanismos de reacción. Sustituyentes y velocidad de reacción. La ecuación de Hammett. Aplicación de la ecuación de Hammett a reacciones de varias etapas. Separación de los efectos inductivo y de resonancia. Separación de los efectos estérico y electrónico. La ecuación de Taft. Catálisis: criterios de catálisis y funciones de un catalizador. Catálisis ácido-base general y específica. Mecanismos de reacción de la hidrólisis de ésteres. Estudio de la interconversión de chalconas y flavanonas.

Tema 7. FENOMENOS DE INTERFASES.

Energía superficial y tensión superficial. Interfaces Líquido-Líquido y Sólido-Líquido. Trabajo de adhesión. Extensión de un líquido sobre un sólido. Tensión Superficial y Adsorción. Energía superficial de Gibbs. Isoterma de adsorción de Gibbs. Adsorción de Gases por Sólidos. Adsorción física y química. Isotermas de Freundlich, Langmuir y BET. Aplicación: determinación del área específica de catalizadores. Adsorción de Solutos por Sólidos. Adsorción por sílica gel de no electrolitos en solventes orgánicos.

Tema 8. REACCIONES HETEROGENEAS.

Reacciones Superficiales. Mecanismo básico de las reacciones de superficie. Características generales. Etapas. Función de la superficie en la catálisis. Importancia de las velocidades iniciales. Reacciones Gas-Sólido. Reacción superficial de fragmentación unimolecular. Cambios del orden de reacción con la etapa determinante de la velocidad. Reacciones Superficiales Bimoleculares. Ecuación de velocidad general. Casos particulares. Reacciones Líquido-Sólido. Isomerización de flavanona e hidroxilación de flavona sobre alúmina. Reacciones en dos Fases Líquidas. Interconversión de

2’-hidroxichalconas en ciclohexano-alcohol acuoso.

Tema 9. VELOCIDAD DE DISOLUCION.
Soluciones de Sólidos no Electrólitos. Solubilidad. Velocidad de solución. Modelo físico. Primera ley de Fick de difusión. Ley de Velocidad de Noyes y Whitney. Variables que la afectan. Efecto de la temperatura: ecuación de Van't Hoff. Velocidad de solución de sustancias ácidas y básicas. Termodinámica del Proceso de Disolución. Interacciones soluto-solvente. Soluciones ideales y no ideales. Fuerza dipolo-dipolo. La unión hidrógeno. Aplicaciones: velocidad de disolución de flavona en etanol.

Tema 10. REACCIONES BIOLOGICAS.
Desarrollo de Microorganismos. Velocidad de crecimiento y muerte. Mecanismos de acción bacteriostática y velocidades de inhibición específica. Ejemplos. Actividad antimicrobiana de flavonoides y benzofenonas. Reacciones Enzimáticas. Actividad catalítica de las enzimas. Curvas de desarrollo. Dependencia con la concentración de sustrato: variación del orden del proceso cinético. Mecanismo de Michaelis-Menten. Influencia del pH y la temperatura. Aplicación: transformación enzimática de flavanona. Mecanismo de bioconversión. Inhibición Enzimática: competitiva, incompetitiva y no competitiva.

VII - Plan de Trabajos Prácticos

A). TRABAJOS PRACTICOS EXPERIMENTALES.

NORMAS BÁSICAS DE SEGURIDAD
Antes de comenzar con el primer trabajo práctico, el JTP responsable de cada grupo, instruye a los alumnos acerca de los 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

1. INFLUENCIA DE LA CONCENTRACIÓN DE REACTIVOS SOBRE LA VELOCIDAD DE UNA REACCIÓN QUÍMICA

Objetivos:
a) Aprender y aplicar las leyes básicas de cinética de reacción.
b) Ilustrar la aplicación de un método espectrofotométrico en la realización de un estudio cinético.
c) Determinar la velocidad específica y el orden de reacción del sistema en estudio.

2. INFLUENCIA DE LA TEMPERATURA EN LA HIDRÓLISIS ÁCIDA DEL ACETATO DE METILO

Objetivos:
a) Aprender y aplicar las leyes básicas de cinética de reacción.
a) Utilizar un método volumétrico en la realización de un estudio cinético.
b) Determinar la velocidad específica y el orden de la reacción.
c) Analizar la variación de la velocidad específica con la temperatura.

3. EFECTO SOLVENTE SOBRE LA OXIDACIÓN DE IODURO POR PERSULFATO.

Objetivos:
a) Aprender las leyes básicas de cinética de reacción.
b) Obtener para reacciones iónicas la expresión que vincula velocidad específica con permitividad.
c) Analizar el efecto solvente para el sistema estudiado y calcular las contribuciones electrostáticas y no electrostáticas a la energía libre total.
d) Estimar el radio del complejo activado

4. DETERMINACIÓN DEL pKa DE 3-HIDROXI-FLAVONA EN MEZCLAS HIDROALCOHÓLICAS

Objetivos:
a) Ilustrar la preparación de soluciones buffers de fuerza iónica constante.
b) Aplicar la ecuación de Henderson-Haselbalch en la determinación del pKa de 3-hidroxi-flavona.
c) Utilizar la ecuación de Kirkwood para interpretar la variación del pKa con la permitividad del medio.

5. CATALISIS ALCALINA EN LA INTERCONVERSION FLAVANONA -2'-HIDROXI-CHALCONA

Objetivos:
a) Explicar el tratamiento de datos cinéticos en reacciones reversibles.
b) Determinar las velocidades específicas directa e inversa de la reacción.
c) Analizar la influencia del catalizador sobre la velocidad de reacción
d) Obtener la constante de equilibrio y la velocidad catalítica básica.
e) Calcular las magnitudes termodinámicas (º y Sº) de la reacción analizada.

6. ADSORCIÓN DE 4-N,N-DIMETILAMINO-CHALCONA EN CICLOHEXANO POR SILICA GEL

Objetivos:
a) Utilizar las isotermas de Freundlich y Lagmuir para analizar el fenómeno de adsorción.
b) Determinar la constante de equilibrio de la reacción de adsorción.
c) Calcular el volumen de una molécula de adsorbato.

7. ESTUDIO DE LA HIDRÓLISIS ENZIMÁTICA DEL ALMIDÓN
Objetivos:
a) Aplicar los conceptos básicos de cinética enzimática para reacciones de un único sustrato
b) Determinar la Vmax de la reacción.
c) Obtener la actividad de la amilasa en muestras de miel.

B). TRABAJOS PRACTICOS DE AULA.

B.1. Resolución de Problemas de Aplicación sobre los diferentes temas de la Asignatura, con el objetivo de que el Alumno aprenda a:

1) Comprender ecuaciones y no a memorizarlas.
2) Leer el significado físico de los diferentes términos y signos algebraicos que aparecen en una ecuación.
3) Representar gráficamente ecuaciones, de forma que pueda ver la variación que se estudia.
4) Proponer problemas que involucren una determinada ecuación, resolverlos, volviendo una y otra vez sobre la ecuación hasta comprender su significado y aplicabilidad.

B.2. Diseño de un trabajo de investigación sobre los temas del Curso escogidos por los Alumnos. Esto implica realizar búsquedas bibliográficas (mediante procedimientos computacionales), estudio de las referencias obtenidas, planificación del experimento y elaboración de una monografía o material didáctico equivalente

VIII - Regimen de Aprobación

REGLAMENTO INTERNO DE LA CATEDRA

Consideraciones generales.
1. Son Trabajos Prácticos los ejercicios, problemas, experimentos de laboratorio, exposiciones, búsquedas bibliográficas, etc., realizados en cantidad, calidad y forma que más convenga a la enseñanza de una asignatura, de manera que, conjuntamente con las clases teóricas, tiendan a la mejor formación del alumno.

2. Toda comunicación o citación de la Cátedra, horarios y fechas de Trabajos Prácticos, de problemas y exámenes parciales, o cualquier otra observación que fuera necesaria, se hará por medio del avisador de la misma.

3. Cada Comisión de Trabajos Prácticos estará constituida como máximo por cuatro alumnos.

4. El Personal Docente de la Asignatura establecerá oportunamente horas de consulta, en los días y horarios que convenga a la mayoría de los alumnos, para responder a las dudas vinculadas con la interpretación y/o realización de los diferentes Trabajos Prácticos.

Sobre la realización de los Trabajos Prácticos.
5. Antes de la realización de un trabajo experimental, todo alumno deberá responder a un cuestionario escrito sobre el tema de trabajo. Sólo podrán realizar el trabajo experimental, aquellos alumnos que contesten satisfactoriamente el referido cuestionario.

6. En ningún caso los alumnos iniciarán un trabajo experimental eléctrico, óptico, etc. sin que previamente el Personal Docente de la Cátedra haya dado la autorización correspondiente.

7. Cada alumno dejará su sector de trabajo y el material utilizado en cada experiencia, en las mismas condiciones que le fuere entregado, guardando el orden y la limpieza en todas las operaciones.

8. Los Trabajos Prácticos de Aula consistirán en la resolución de problemas, aplicando los conocimientos desarrollados por el Personal Docente, de acuerdo al programa teórico del Asignatura y/o al procesamiento de los datos experimentales obtenidos en el laboratorio.

9. Cada alumno deberá llevar dos cuadernos de anotaciones. Uno dedicado exclusivamente a los Trabajos Prácticos de Aula. El otro, a los Trabajos Prácticos de Laboratorio. En este último cuaderno el Alumno confeccionará previamente a cada Trabajo Práctico, un esquema de las operaciones a realizar y consignará en forma ordenada todos los valores experimentales que obtenga. Una vez finalizada la experiencia, realizarán los cálculos y las correspondientes gráficas, si fueran necesarios.

10. Los cuadernos de Trabajos Prácticos de Aula y de Laboratorio, deberán ser visados por el Jefe de Trabajos Prácticos toda vez que se complete un Trabajo. Se podrá rechazar el informe presentado a la firma, cuando no se haya cuidado el orden y/o los resultados obtenidos no fueran satisfactorios.

Sobre la aprobación de los Trabajos Prácticos.
11. Un Trabajo Práctico de Laboratorio, se dará por aprobado si el alumno cumple, con los requisitos siguientes: a) rinde satisfactoriamente el cuestionario previo; b) realiza la parte experimental correctamente; c) presenta un informe ordenado, con las operaciones fundamentales, cuadro de valores, gráficas, errores cometidos, etc. Los valores obtenidos experimentalmente deben ser coherentes con los tabulados. De no satisfacerse estos requisitos, el alumno será considerado ausente.

12. Un Trabajo Práctico de Aula se dará por aprobado si el alumno cumple con los siguientes requisitos:

a) posee un conocimiento teórico mínimo de los problemas a resolver.
b) presenta un informe correcto.

Sobre las recuperaciones y aprobaciones de Trabajos Prácticos.
13. Para regularizar el curso los alumnos deberán cumplir con los siguientes requisitos:
a) Haber asistido al 80% de las clases Teórico-Prácticas.
b) Haber realizado la totalidad de los Trabajo Prácticos de Laboratorio. El alumno dispondrá de las recuperaciones necesarias para lograr este objetivo.

Sobre las examinaciones parciales.
14. Durante el desarrollo de la Asignatura se tomarán tres parciales escritos sobre los Trabajos Prácticos, cuyas fechas se darán a conocer con 7 (siete) días de anticipación. Podrán rendir cada examen parcial aquellos alumnos que hayan realizado los Trabajos Prácticos de Laboratorio y Aula correspondientes a dicho parcial.

15. La Ord. 13/03 CS en su Artículo 24 establece: “cada parcial tendrá al menos una recuperación y no más de dos”. Por consiguiente cada parcial tendrá dos recuperaciones. La Cátedra considerará dentro de su crédito horario los días destinados a estas recuperaciones.

Sobre las examinaciones libres.
16. El Alumno que en condición de libre, se presente a rendir la Asignatura, deberá aprobar:
a) un examen práctico.
b) un examen teórico.

Del examen práctico:
Este constará de dos partes a saber:
A. Examinación sobre los Trabajos Prácticos de Aula.
El alumno deberá resolver satisfactoriamente, una serie de cinco problemas tipo, como los desarrollados a lo largo de la Asignatura.
B. Examinación sobre Los Trabajos Prácticos de Laboratorio.
Del conjunto de trabajos experimentales que forman parte del plan de Trabajos Prácticos de la materia, se seleccionará por sorteo uno de ellos. El alumno deberá realizarlo en forma total.
El examen práctico se dará por aprobado o no-aprobado. La aprobación del mismo, es condición ‘sine qua nom’ para poder pasar al examen teórico.

Del examen teórico:
Será de las mismas características que la evaluación por examen final, para los alumnos regulares.

IX - Bibliografía Básica

[1] LIBROS.
[2] * ‘Organic Reactions. Equilibria, Kinetics and Mechanism’. F. Ruff and I.G. Csizmadia. Elsevier, London, 1994.
[3] * ‘Química Física’ P. W. Atkins. 8ª ed., Editorial Médica Panamericana, 2008.
[4] * ‘Chemical Kinetics’. Keith J. Laidler. 3rd ed. Harper-Collins. NY, 1987.
[5] * 'Fisicoquímica'. K.J. Laidler, J.H. Meiser. Compañía Editorial Continental, 2003.
[6] * ‘Mechanism in Organic Chemistry’. P. Sykes, Longman, England, 1997.
[7] * ‘Physical Organic Chemistry’. 2nd ed., N. Isaacs, Longman, England, 1995.
[8] * ‘Physical Chemistry of Surfaces’. A. W. Adamson. 5th ed., Wiley & Sons, USA, 1990.
[9] * 'Fisicoquímica'. G. W. Castellan, Addison-Wesley Iberoamericana, USA, 1987.
[10] * 'Fisicoquímica para Biólogos'. J. G. Morris. Ed. Reverté. 1982.
[11] PUBLICACIONES.
[12] * Spectrophotometric investigation of the complexation mechanism of Al(III) by 2,4-dihydroxy-acetophenone. Spectrochim. Acta A, 77, 51-58, 2010.
[13] * Isomerization of 4'methoxyflavanone in alkaline medium. Determination of the enolate formation constant. J. Molec. Struct. (Theochem), 636, 157-166, 2003

[14] * 'Kinetic Determination of pKa in 2-Hydroxychalcones', Tetrahedron Lett., 34(29), 4615-4618, 1993
[15] * Determination of dissociation constants of p-hydroxybenzophenone in aqueous-organic mixtures. Solvent effects. Can. J. Chem, 86, 462-469, 2008.
[16] * UV solvatochromic shifts of 4-hydroxy-benzophenone and 2,4-dihydroxy-benzophenone in ethanol-acetonitrile mixtures. Spectrochim. Acta Part A, 59, 2985-2995, 2003.
[17] * The effects of substituents and solvents on the conformation of benzophenones. Internet Electron. J. Mol. Des., 3, 387-399, 2004, http//www biochempress.com.
[18] * Effects of the solvent and temperature on the 2:1 catechol-Al(III)-complex. Spectrochim. Acta Part A (68, 387-393, 2007.
[19] * 'A theoretical and experimental study of adsorption from dilute cyclohexane solutions of non-electrolytes: 4-X-chalcones on silica gel', J. Molec. Struct. (Teochem), 579(1), 121-137, 2002.
[20] * 'Adsorption of Simple Flavonoids. Heterogeneous Isomerization of Flavanone in 2'-Hydroxychalcone'. J. Colloid Interf. Sci., 180, 144-148, 1996.
[21] * 'Consideraciones Sobre el Significado de Algunas Constantes Fisicoquímicas'. Inf. Tecnol. (Chile), 8, 43-48, 1997.
[22] * 'A theoretical and experimental study on the solubility, dissolution rate, structure and dipolar moment of flavone in ethanol', J. Molec. Struct. (Teochem), 585, 1-13, 2002.
[23] * 'Antibacterial activity of flavonoids against methicillin-resistant Staphylococcus aureus strains', J. Theor. Biol., 205(2), 231-240, 2000.
[24] * Inhibition of xanthine-oxidase by 2,4-Dihydroxy-benzophenone and 2,3,4-trihydroxy-benzophenone. G.T. Castro, S.E. Blanco, F. H. Ferretti. Internet Electron. J. Mol. Des. 3, 684-703, 2004, http//www biochempress.com.
[25] OTROS
[26] Guías de Trabajo Prácticos de Laboratorio y Aula de la Cátedra

X - Bibliografia Complementaria

[1] LIBROS.
[2] * 'Interfacial Forces and Fields: Theory and Applications (Surfactant Science Series, V. 85)', Jyh-Ping Hsu (Editor), Marcel Dekker Inc., NY, 1999.
[3] * 'Particle and Surface Characterization Methods', R.H. Müller and W. Mehnert (Editors), Medpharm Scientific Publishers, Stuttgart, Germany, 1997.
[4] * 'Reactividad y Bioactividad de Flavonoides', Capítulo 15, pp 353-373. 'Temas Actuales de Química Cuántica' Editores: J.M. Fernández Rico y J.M. García de la Vega. Ediciones UAM, Madrid 1998.
[5] PUBLICACIONES.
[6] * Y. Marcus, 'The properties of organic liquids that are relevant to their use as solvating solvents,' Chem. Soc. Rev., 409 (1993).
[7] * Mechanism of the complexation reaction of aluminum chloride with o-hydroxy-benzophenone. J. Molec. Struct. (Theochem), 634, 107-120, 2003.
[8] * 'Influencia del pH en la Transformación Microbiológica de Flavanona y 2-Hidroxichalcona por A. niger NRRL 3', Rev. Microbiol., Sao Paulo, 21(2), 175-182, 1990.
[9] * 'Alternative Aplication of the Michaelis and Menten Equation on Enzyme-Catalized Reaction Analysis', Com Biol (Bs Aires), 11(4), 321-355, 1993.
[10] * 'Acción de la Permitividad del Disolvente sobre la Disociación del Acido Pícrico', An. Asoc. Quím. Argent., 83(3), 129-134, 1995.
[11] * 'Conformational Equilibrium and Intramolecular Hydrogen Bond of 4'-X and 4-X substituted 2(OH)chalcones', J. Molec. Struct. (Teochem), 493, 187-197, 1999.
[12] * 'Structure and UV solvatochromic shifts of sulfamethoxazole in alcoholic solvents and water', J. Molec. Struct. (Teochem), 582, 143-157, 2002.
[13] * Solvent and substituent effects on the conformational equilibia and intramolecular hydrogen bonding of 4-substituted-2-hydroxybenzaldehydes. Tetrahedron Lett., 48, 2577-2581, 2007.

XI - Resumen de Objetivos

Utilizar el crédito horario de 140h asignado (distribuido en 50h de clases teóricas y 90h de trabajos prácticos de laboratorio y de aula) 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 novedosos, homogéneos y heterogéneos. Su

objetivo primordial es enseñar conocimientos y leyes básicas que permiten explicar la ocurrencia de las reacciones químicas y los mecanismos por los cuales se verifican. Esto implica cumplimentar los siguientes objetivos parciales: a) Conocer los principales factores operativos involucrados en experimentos cinéticos; b) Formular ecuaciones empíricas de velocidad; c) Emplear las teorías de velocidad más comunes para comprender y justificar cómo suceden las reacciones químicas y biológicas. d) Proponer y analizar los mecanismos de reacción que sean pertinentes. De este modo, contribuir a que los Alumnos aprendan de forma amena y fácil, diversos conceptos y herramientas propios de la Cinética de Reacción, que son imprescindibles para desarrollar Asignaturas profesionales posteriores estrechamente vinculadas con las incumbencias específicas de la Carrera de Licenciatura en Química.

XII - Resumen del Programa

Tema 1. CINETICA DE REACCIONES ELEMENTALES. Principios Básicos de Cinética de Reacción. La Ecuación de Velocidad Integrada. Ecuaciones Cinéticas Simplificadas de Seudo-Orden.

Tema 2. DETERMINACION NUMERICA DEL ORDEN Y CONSTANTE DE VELOCIDAD. Orden de Reacción desde Ecuaciones Diferenciales de Velocidad. Mediciones Experimentales.

Tema 3. CINETICA DE REACCIONES COMPLEJAS. Reacciones Reversibles. Reacciones Paralelas. Reacciones Consecutivas. Métodos Aproximados para el Tratamiento de Reacciones Complejas.

Tema 4. TEORIAS DE REACCIONES QUIMICAS. Ley de Arrhenius. Teoría del Estado de Transición. Presión y Velocidad de Reacción.

Tema 5. EFECTOS DEL MEDIO DE REACCION. La Estructura de Líquidos. Solvatación. Efectos Solvente sobre Velocidades Específicas. Reacciones que involucran dipolos.

Tema 6. MECANISMOS. CATALISIS HOMOGENEA. Mecanismos de reacción. Sustituyentes y velocidad de reacción. Catálisis, criterios de catálisis. Catálisis ácido-base.

Tema 7. FENOMENOS DE INTERFASES. Interfaces Líquido-Líquido y Sólido-Líquido. Tensión Superficial y Adsorción. Adsorción de Gases por Sólidos. Adsorción de Solutos por Sólidos.

Tema 8. REACCIONES HETEROGENEAS. Reacciones Superficiales. Reacciones Gas-Sólido. Reacciones Superficiales Bimoleculares. Reacciones Líquido-Sólido. Reacciones en dos Fases Líquidas.

Tema 9. VELOCIDAD DE DISOLUCION. Soluciones de Sólidos no Electrólitos. Ley de Velocidad de Noyes y Whitney. Termodinámica del Proceso de Disolución.

Tema 10. REACCIONES BIOLOGICAS. Desarrollo de Microorganismos. Velocidad de crecimiento y muerte. Ejemplos. Reacciones Enzimáticas. Mecanismo de Michaelis-Menten. Inhibición Enzimática

XIII - Imprevistos

XIV - Otros