Ministerio de Cultura y Educación
Universidad Nacional de San Luis
Facultad de Química Bioquímica y Farmacia
Departamento: Quimica
Area: Quimica Fisica

(Programa del año 2022)
(Programa en trámite de aprobación)
(Presentado el 21/09/2022 09:28:41)

I - Oferta Académica

Materia	Carrera	Plan	Año	Período
QUIMICA FISICA II	PROF.EN QUÍMICA	6/04	2022	2° cuatrimestre

II - Equipo Docente

Docente	Función	Cargo	Dedicación
ALMANDOZ, MARIA CRISTINA	Prof. Responsable	P.Tit. Exc	40 Hs
GASULL, ESTELA ISABEL	Prof. Colaborador	P.Tit. Exc	40 Hs
SANCHO, MATIAS ISRAEL	Prof. Colaborador	P.Adj Exc	40 Hs
MELO, GISELA MABEL	Responsable de Práctico	JTP Exc	40 Hs

III - Características del Curso

Credito Horario Semanal				
Teórico/Práctico	Teóricas	Prácticas de Aula	Práct. de lab/ camp/ Resid/ PIP, etc.	Total
4 Hs	Hs	Hs	3 Hs	7 Hs

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

Duración			
Desde	Hasta	Cantidad de Semanas	Cantidad de Horas
08/08/2022	18/11/2022	15	110

IV - Fundamentación

Entre los ‘Objetivos Generales’ de la Carrera Profesorado en Química, se alienta la ‘formación de profesores altamente capacitados en la enseñanza de la Química y la participación en actividades interdisciplinarias de las ciencias naturales’. En este sentido, es evidente que la Química-Física, que constituye un amplio campo del conocimiento al cual contribuyen la Matemática, la Física, la Biología y obviamente la Química, resulta esencial para alcanzar los objetivos precitados. Por consiguiente, es clara la importancia de considerar temas de Cinética de Reacción y sus aplicaciones en distintos sistemas de interés fisicoquímico y biológico. Estos temas son precisamente, los que se desarrollan en este Curso de Química-Física II.

V - Objetivos / Resultados de Aprendizaje

Haciendo uso de una metodología de enseñanza teórico-práctica, propender a que los estudiantes aprendan de forma amena y fácil, cuales son los principales factores operativos que afectan los procesos cinéticos, la representación de los cambios observados en los mismos mediante ecuaciones empíricas de velocidad y como se establecen y como se analizan los mecanismos de reacción en sistemas homogéneos y heterogéneos. Asimismo, enseñar la aplicación de los conocimientos adquiridos a sistemas químicos y biológicos de interés científico y aplicado. De esta manera se contribuye a que los futuros profesores utilicen diversas herramientas cinéticas, para interpretar y explicar los temas abordados por otras Asignaturas paralelas y posteriores, íntimamente relacionadas con las incumbencias específicas de la Carrera Profesorado en Química. Favoreciendo, por tanto, una alta capacitación en la enseñanza en Química, que contribuirá en la creación, desarrollo y transmisión del conocimiento y estimulará la formación de un espíritu crítico y creativo.

VI - Contenidos

Tema 1. CINÉTICA 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. DETERMINACIÓN NUMÉRICA 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. Medidas Experimentales. Análisis de reacciones de primer y segundo orden usando mediciones espectrofotométricas, conductimétricas y polarimétricas. Problemas de aplicación.

Tema 3. CINÉTICA 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. Aproximación del pre-equilibrio. Aproximación del estado estacionario.

Tema 4. TEORÍAS DE REACCIONES QUÍMICAS.
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. Presión y Velocidad de Reacción. Volumen de activación de reacciones orgánicas. Problemas de aplicación.

Tema 5. EFECTOS DEL MEDIO DE REACCIÓN.
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. CATÁLISIS HOMOGÉNEA.
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.

Tema 7. FENÓMENOS DE INTERFASES - REACCIONES HETEROGENEAS.
Energía superficial y tensión superficial. Interfaces Líquido-Líquido y Sólido-Líquido. Trabajo de adhesión. Extensión de un líquido sobre un sólido. Adsorción por sólidos. Adsorción física y química. Isotermas de adsorción. 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. Reacciones superficiales bimoleculares. Ecuación de velocidad general. Casos particulares. Reacciones líquido-sólido.

Tema 8. REACCIONES BIOLÓGICAS.
Desarrollo de microorganismos. Velocidad de crecimiento y muerte. Mecanismos de acción bacteriostática y velocidades de inhibición específica. Ejemplos. Reacciones enzimáticas de sustrato único. Dependencia con la concentración de sustrato: variación del orden del proceso cinético. Mecanismo de Michaelis-Menten. Influencia del pH y la temperatura. Inhibición enzimática: competitiva, incompetitiva y no competitiva. Problemas de Aplicación.

VII - Plan de Trabajos Prácticos

NORMAS BÁSICAS DE SEGURIDAD

Antes de comenzar con el primer trabajo práctico, el JTP responsable de cada grupo, instruye a los estudiantes 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

A). TRABAJOS PRÁCTICOS EXPERIMENTALES.

Cada TP de laboratorio se realiza en jornadas de cuatro (4) horas

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 4-HIDROXI-BENZOFENONA 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 (DHº y DSº) 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. DETERMINACIÓN DEL COMPORTAMIENTO CINÉTICO E INHIBITORIO DE ENZIMAS EXTRAÍDAS DE FRUTAS
Objetivos:
a) Aplicar los conceptos básicos de cinética enzimática para reacciones de un único sustrato.
b) Determinar la KM y Vmax de la reacción.
c) Verificar la inhibición de la cinética de reacción.

B) TRABAJOS PRÁCTICOS DE AULA.

B.1. Resolución de Problemas de Aplicación sobre los diferentes temas de la Asignatura. La asignatura se desarrolla bajo la modalidad teórico-práctica . A continuación de la explicación de los conceptos teóricos, los estudiantes resuelven los problemas de la guía de TP correspondientes al tema teórico. Durante el desarrollo de las clases teórico-prácticas se desea lograr que el Estudiante 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 educativa sobre los temas del Curso. Este trabajo tendrá una temática elegida por los Estudiantes y comprende:
- la realización de búsquedas bibliográficas,
- estudio de las referencias obtenidas,
- planificación del experimento o trabajo práctico de aula, y,
- elaboración de una guía de estudios o material didáctico equivalente.

VIII - Regimen de Aprobación

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 estudiante.

2. Toda comunicación o citación de la Asignatura, 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 estudiantes.

4. El Personal Docente de la Asignatura establecerá oportunamente horas de consulta, en los días y horarios que convenga a la mayoría de los estudiantes, 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 estudiante deberá responder a un cuestionario escrito sobre el tema de trabajo. Sólo podrán realizar el trabajo experimental, aquellos estudiantes que contesten satisfactoriamente el referido cuestionario.

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

7. Cada estudiante 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 de la Actividad Curricular y/o al procesamiento de los datos experimentales obtenidos en el laboratorio.

Sobre la aprobación de los Trabajos Prácticos.
9. Un Trabajo Práctico de Laboratorio, se dará por aprobado si el estudiante 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 estudiante será considerado ausente.

10. Un Trabajo Práctico de Aula se dará por aprobado si el estudiante resuelve los problemas de la clase correspondiente y presenta un informe correcto.

Sobre las recuperaciones y aprobaciones de Trabajos Prácticos.
11. Para regularizar el curso los estudiantes 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.

Sobre las examinaciones parciales.
Para aprobar Química Física II el estudiante deberá aprobar el 100% de los exámenes parciales
12. Condición Regular. Durante el desarrollo de la Asignatura se tomarán tres parciales escritos sobre los Trabajos Prácticos, cuyas fechas se darán a conocer con 10 (diez) días de anticipación. Podrán rendir cada examen parcial aquellos estudiantes que hayan realizado los Trabajos Prácticos de Laboratorio y Aula correspondientes a dicho parcial. Los parciales se aprueban con seis (6) puntos, teniendo derecho a las recuperaciones pautadas en la reglamentación vigente (Ord.CS 32/14 y Ord. CD 004/15 FQBF). El Curso considera dentro de su crédito horario los días destinados a estas evaluaciones.
Es requisito fundamental para la aprobación de la actividad curricular la preparación y posterior exposición ante sus pares de una guía de trabajos prácticos adaptada a nivel secundario, desarrollando un tema seleccionado entre los Trabajos Prácticos de Laboratorio, de Aula o algún otro contenido del Programa de Química Física II. Esta actividad le permitirá al estudiante adquirir habilidades didácticas para la explicación de problemas y/o experiencias de laboratorio.

13. EXAMEN FINAL
Para aprobar el curso el estudiante deberá cumplir:
a)con los requisitos de regularización establecidos en el presente programa.
b)con la aprobación del examen final (en cualquiera de los turnos establecidos por el calendario académico de la Facultad), cuya calificación mínima cuantitativa es de 4 (cuatro) puntos.

14. Condición Promoción SIN EXAMEN FINAL. Cumplidas las exigencias de materias aprobadas y regulares que establece el plan vigente y los requisitos respecto de asistencias y aprobación de los trabajos prácticos solicitados a los estudiantes regulares; el estudiante deberá aprobar tres examinaciones parciales teórico-prácticas (las cuales se rinden en fechas diferentes dentro de la misma semana) y una evaluación integradora para tener la condición de PROMOCIÓN. Estas examinaciones se aprueban con el 80% (8 puntos). Para mantener la condición de promoción el estudiante deberá aprobar de primera instancia dos (2) evaluaciones parciales (esto es, puede desaprobar solo un parcial teórico y un práctico). Tendrá una recuperación para la evaluación antes del parcial integrador. La calificación final será el promedio de las calificaciones obtenidas. En el caso de no satisfacer alguna de las exigencias para promocionar, el estudiante automáticamente quedará incorporado al Régimen de Estudiantes Regulares. El Curso considera dentro de su crédito horario los días destinados a estas evaluaciones.

Sobre las examinaciones libres.

15. El estudiante 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 estudiante deberá resolver satisfactoriamente, una serie de cinco problemas tipo, como los desarrollados a lo largo de la Actividad Curricular.
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 estudiante 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:
Tendrá las mismas características que la evaluación por examen final, para los estuidantes regulares.

IX - Bibliografía Básica

[1] 'Química Física', P. W. Atkins. 8ª ed., Editorial Médica Panamericana, Buenos Aires, 2008.
[2] 'Chemical Kinetics and Reactions Dynamics', S.K. Upadhayay. Ed. Springer-Anamaya, N.Y., 2006.
[3] 'Fisicoquímica', K.J. Laidler, J.H. Meiser. Compañía Editorial Continental, México, 2003.
[4] 'Organic Reactions. Equilibria, Kinetics and Mechanism', F. Ruff and I.G. Csizmadia. Elsevier, London, 1994.
[5] 'Chemical Kinetics', Keith J. Laidler. 3rd ed. Harper-Collins. NY, 1987.
[6] 'The Effect of Temperature and Ionic Strength on the Oxidation of Iodide by Iron(III): A Clock Reaction Kinetic Study', J. Chem. Educ., 89, 540−544, 2012.
[7] 'An Inexpensive Kinetic Study: The Reaction FD&C Red #3 (Erythrosin B) with Hypochlorite', J. Chem. Educ., 84, 3, 480-482, 2007.
[8] 'Kinetics and Mechanism of Oxidation of Diethyl Ether by Chloramine-T in Acidic Medium', E-Journal of Chemistry, 9, 642-649, 2012.
[9] 'An Introduction to Enzyme Kinetics', Part Deux. J. Chem. Educ., 88, 63–66, 2011.
[10] 'The Reaction of a Food Colorant with Sodium Hypochlorite. A Student - Designed Kinetics Experiment'. J. Chem. Educ., 75, 1142-1444, 1998.
[11] Guías de Trabajo Prácticos de Laboratorio y Aula de la Asignatura, 2020.

X - Bibliografia Complementaria

[1] 'Physical Chemistry', R.G. Mortimer. 2º Ed., Academic Press, California, 2000.
[2] 'Physical Pharmacy: Physical Chemical Principles in the Pharmaceutical Sciences', A. Martin, P. Bustamante, A.H.C. Chun. Lea & Febiger, N.Y., 1993.
[3] 'Kinetics of Reduction of Toluidine Blue with Sulfite Kinetic Salt Effect in Elucidation of Mechanism', J. Chem. Educ., 77, 506-509, 2000.
[4] 'Spectrophotometric investigation of the complexation mechanism of Al(III) by 2,4-dihydroxy-acetophenone', Spectrochim. Acta A, 77, 51-58, 2010.
[5] 'Effects of the solvent and temperature on the 2:1 catechol-Al(III)-complex'. Spectrochim. Acta Part A, 68, 387-393, 2007.
[6] 'Isomerization of 4'methoxyflavanone in alkaline medium. Determination of the enolate formation constant', J. Molec. Struct. (Theochem), 636, 157-166, 2003.

XI - Resumen de Objetivos

Hacer uso del crédito horario de 110h asignado para desarrollar los 8 temas que lo constituyen. Estos comprenden principalmente los fundamentos de la Cinética de Reacción y sus aplicaciones en diversos sistemas químicos y biológicos novedosos, homogéneos y heterogéneos. El objetivo principal 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 como suceden las reacciones químicas y biológicas. d) Proponer y analizar los mecanismos de reacción que sean pertinentes. e) Diseñar una guía de estudios o material didáctico equivalente sobre un tema de la actividad curricular, adaptado a la enseñanza a nivel secundario. De este modo, contribuir a que los Estudiantes aprendan de forma amena y fácil, diversos conceptos y herramientas propios de la Cinética de Reacción, de utilidad en el desarrollo de otras Asignaturas relacionadas con el quehacer propio de otros campos del conocimiento científico y humanístico.

XII - Resumen del Programa

Tema 1. REACCIONES HOMOGÉNEAS.
Velocidad de reacción. Concentración de reactivos y velocidad de reacción. Medidas experimentales. Reacciones de primer orden: Métodos de análisis de datos cinéticos.

Tema 2. REACCIONES DE ORDEN SUPERIOR.
Reacciones de segundo orden. Reacciones de orden "n". Reacciones compuestas.

Tema 3. TEMPERATURA Y VELOCIDAD DE REACCIÓN.
Ley de Arrhenius. Teoría de las colisiones. Teoría de Eyring de las velocidades absolutas.

Tema 4. REACCIONES GASEOSAS.
Reacciones elementales. Reacciones complejas. Reacciones en cadena.

Tema 5. REACCIONES IÓNICAS.
Reacciones entre iones. Reacciones que involucran dipolos: efecto del disolvente, expresión de Kirkwood.

Tema 6. MECANISMOS. CATÁLISIS HOMOGÉNEA.
Mecanismos de reacción. Catálisis. Catálisis ácido-base.

Tema 7. REACCIONES HETEROGÉNEAS.
Tensión superficial. Adsorción por sólidos. Reacciones superficiales. Reacciones gas-sólido. Reacciones superficiales bimoleculares. Reacciones líquido-sólido.

Tema 8. REACCIONES BIOLÓGICAS.
Desarrollo de microorganismos. Reacciones enzimáticas de sustrato único. Inhibición enzimática.

XIII - Imprevistos

La actividad curricular cuenta con un Aula Virtual (Moodle) en la que se alojan los recursos didácticos de la ésta, como así también a través de ella se establece una de las formas de comunicación (https://aulascie.unsl.edu.ar/course/view.php?id=193§ion=0#tabs-tree-start).
El crédito horario total (5 horas) se completará con clases de consulta.

XIV - Otros

ELEVACIÓN y APROBACIÓN DE ESTE PROGRAMA	
	Profesor Responsable
Firma:	
Aclaración:	
Fecha:	