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

(Programa del año 2024)
(Programa en trámite de aprobación)
(Presentado el 19/11/2024 16:34:28)

I - Oferta Académica

Materia	Carrera	Plan	Año	Período
QUÍMICA FÍSICA II	LIC. EN QUIMÍCA	12/21	2024	2° cuatrimestre

II - Equipo Docente

Docente	Función	Cargo	Dedicación
ALMANDOZ, MARIA CRISTINA	Prof. Responsable	P.Tit. Exc	40 Hs
SANCHO, MATIAS ISRAEL	Prof. Colaborador	P.Adj Exc	40 Hs
DAVILA, YAMINA ANDREA	Responsable de Práctico	JTP 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
5 Hs	Hs	Hs	3 Hs	8 Hs

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

Duración			
Desde	Hasta	Cantidad de Semanas	Cantidad de Horas
05/08/2024	15/11/2024	15	120

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-práctica, lograr que los estudiantes 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 estudiantes, 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. 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 pseudo-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.

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 HETEROGÉNEAS.

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. Interconversión de 2’-hidroxichalconas en ciclohexano.

Tema 9. VELOCIDAD DE DISOLUCIÓN.

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.

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 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.
Cada TP de laboratorio se realiza en jornadas de tres (3) 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 UNA REACCIÓN QUÍMICA
Objetivos:
a) Aprender y aplicar las leyes básicas de cinética de reacción.
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

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.

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 la cartelera digital 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. Quienes no aprueben este cuestionario, deberán recuperarlo con posterioridad. Es obligatoria al aprobación del 100% de los cuestionarios de laboratorio

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 del Asignatura 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 siguientes requisitos : 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. 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 Trabajos Prácticos de Laboratorio.

Sobre los exámenes parciales.
Para aprobar la asignatura 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 al comienzo del cuatrimestre. 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 siete (7) puntos, teniendo derecho a las recuperaciones pautadas en la reglamentación vigente (Ord.CS 32/14 y Ord. CD 004/15 FQBF). La asignatura considera dentro de su crédito horario los días destinados a estas evaluaciones.

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. La asignatura 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 haber aprobado previamente la totalidad de los trabajos prácticos de Laboratorio. El examen que deberá rendir en condición de LIBRE consta de dos partes:
a) un examen práctico.
b) un examen teórico.

Del examen práctico:
El estudiante deberá resolver satisfactoriamente al menos un 70% de una serie de problemas tipo, como los desarrollados a lo largo de la cursada de la Asignatura.

Del examen teórico:
Tendrá las mismas características que la evaluación por examen final para los estudiantes regulares.

IX - Bibliografía Básica

[1] ‘Química Física’, P. W. Atkins. 8ª ed., Editorial Médica Panamericana, Buenos Aires, 2008.
[2] ‘Physical chemistry’, T.Engel, P. Reid, 3rd ed. Pearson, 2013.
[3] ‘Chemical Kinetics and Reactions Dynamics’, S.K. Upadhayay. Ed. Springer-Anamaya, N.Y., 2006.
[4] ‘Fisicoquímica’, K.J. Laidler, J.H. Meiser. Compañía Editorial Continental, México, 2003.
[5] ‘Organic Reactions. Equilibria, Kinetics and Mechanism’, F. Ruff and I.G. Csizmadia. Elsevier, London, 1994.
[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] ‘The Reaction of a Food Colorant with Sodium Hypochlorite. A Student - Designed Kinetics Experiment’. J. Chem. Educ., 75, 1142-1444, 1998.
[10] Guías de Trabajo Prácticos de Laboratorio y Aula de la Asignatura, 2024.

X - Bibliografia Complementaria

[1] ‘Physical Pharmacy: Physical Chemical Principles in the Pharmaceutical Sciences', A. Martin, P. Bustamante, A.H.C. Chun. Lea & Febiger, N.Y., 2017.
[2] ‘Physical Chemistry', R.G. Mortimer. 2º Ed., Academic Press, California, 2000.

XI - Resumen de Objetivos

Utilizar el crédito horario de 140h asignado para desarrollar los temas propuestos, 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 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. CINÉTICA DE REACCIONES ELEMENTALES. Principios Básicos de Cinética de Reacción. La Ecuación de Velocidad Integrada. Ecuaciones Cinéticas Simplificadas de pseudo-orden.
Tema 2. DETERMINACIÓN NUMÉRICA DEL ORDEN Y CONSTANTE DE VELOCIDAD. Orden de Reacción desde Ecuaciones Diferenciales de Velocidad. Mediciones Experimentales.
Tema 3. CINÉTICA DE REACCIONES COMPLEJAS. Reacciones Reversibles. Reacciones Paralelas. Reacciones Consecutivas. Métodos Aproximados para el Tratamiento de Reacciones Complejas.
Tema 4. TEORÍAS DE REACCIONES QUÍMICAS. Ley de Arrhenius. Teoría del Estado de Transición. Presión y Velocidad de Reacción.
Tema 5. EFECTOS DEL MEDIO DE REACCIÓN. La Estructura de Líquidos. Solvatación. Efectos Solvente sobre Velocidades Específicas. Reacciones que involucran dipolos.
Tema 6. MECANISMOS. CATÁLISIS HOMOGÉNEA. Mecanismos de reacción. Sustituyentes y velocidad de reacción. Catálisis, criterios de catálisis. Catálisis ácido-base.
Tema 7. FENÓMENOS 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 HETEROGÉNEAS. Reacciones Superficiales. Reacciones Gas-Sólido. Reacciones Superficiales Bimoleculares. Reacciones Líquido-Sólido. Reacciones en dos Fases Líquidas.
Tema 9. VELOCIDAD DE DISOLUCIÓN. Soluciones de Sólidos no Electrólitos. Ley de Velocidad de Noyes y Whitney. Termodinámica del Proceso de Disolución.

XIII - Imprevistos

Cualquier imprevisto sobre el normal de dictado de la asignatura será informado a través de la cartelera digital de la materia.

XIV - Otros

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