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 02/12/2024 11:43:28)

I - Oferta Académica

Materia	Carrera	Plan	Año	Período
() AVANCES EN CINÉTICA QUÍMICA	LIC. EN QUIMÍCA	3/11	2024	2° cuatrimestre

II - Equipo Docente

Docente	Función	Cargo	Dedicación
SANCHO, MATIAS ISRAEL	Prof. Responsable	P.Adj Exc	40 Hs
DAVILA, YAMINA ANDREA	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**
Hs	Hs	Hs	Hs	4 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	60

IV - Fundamentación

Este Curso Optativo tiene como finalidad específica el enriquecimiento de la formación fisicoquímica general de los Estudiantes 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 Estudiantes 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 Estudiantes 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

A). TRABAJOS PRACTICOS EXPERIMENTALES.
Sistema a estudiar:
* Reducción del azul de metileno por ácido ascórbico
El estudio cinético la reacción se realizará en 4 (cuatro) 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 Estudiantes:
* 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 ESTUDIANTES REGULARES
1. Inscripción: podrán inscribirse y cursar como regulares los estudiantes 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 estudiantes deberán cumplir con los siguientes requisitos:
a) Haber asistido al 80% de las clases Prácticas.
b) Haber realizado la totalidad de los Trabajo Prácticos de Laboratorio.
3. Examinaciones parciales y recuperaciones: se tomará un (1) parcial escrito sobre los Trabajos Prácticos. Podrán rendir el examen parcial aquellos estudiantes que hayan realizado los Trabajos Prácticos de Laboratorio y Aula correspondientes. El parcial tendrá dos instancias de recuperación. El parcial se apruba con una calificación mínima de siete (7) puntos.
4. 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.

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. Clases teóricas: el alumno deberá asistir al 80% de las clases teóricas programadas.
3. Trabajos Prácticos: la asistencia a trabajos prácticos es obligatoria. Los alumnos deben haber asistido al 80% de las Clases de prácticas y haber realizado la totalidad de los Trabajo Prácticos de Laboratorio.
4. Examen parcial y recuperaciones: se tomará un parcial escrito Teórico y un parcial sobre los Trabajos Prácticos. Podrá recuperar una sola evaluación (teórica o práctica). La nota de aprobación de cada evaluación no podrá ser menor a ocho (8).
5. Pérdida de la promoción: en caso de no cumplir con algunas de las condiciones establecidas para el régimen de promoción, los estudiantes pasará automáticamente a la condición de regular.
6. Nota final: la calificación final será el promedio de las evaluaciones parciales y de la calificación obtenida en el informe de laboratorio.

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] * The kinetics and mechanisms of the reactions of iron(III) with quercetin and morin. J. Inorg. Biochem. 102, 127–136, 2008.
[9] * A Simple algorithm for the distinction of reaction mechanisms based on the measurement of additive properties. J. Chem. Educ., 73(3), 214-216, 2001.
[10] *Effect of different substituents on the one-pot formation of 3,4,5-substituted furan-2(5H)-ones: a kinetics and mechanism study. RSC Advances, 5, 52508, 2015.
[11] * Kinetic solvent isotope effect: a simple, multipurpose physical chemistry experiment. J. Chem. Educ., 74(5), 562-565, 1997.
[12] * Spectrophotometric investigation of the complexation mechanism of Al(III) by 2,4-dihydroxy-acetophenone. Spectrochim. Acta A, 77, 51-58, 2010.
[13] * Guías de Trabajo Prácticos de Laboratorio y Aula

X - Bibliografia Complementaria

[1] * Oxidative degradation of norfloxacin by a lipophilic oxidant, cetyltrimethylammonium permanganate in water–acetonitrilemedium: A kinetic and mechanistic study. J. Mol. Liquids, 209, 327-335, 2015
[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 de 60h 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

Cualquier imprevisto será informado en la cartelera digital de la asignatura.

XIV - Otros

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