



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

(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 QUIMICA | 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 - Teoría con prácticas de aula y laboratorio | 2° 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:

- Orden de reacción
- Influencia del catalizador sobre la velocidad de reacción.
- Influencia de la fuerza iónica sobre la velocidad de reacción
- Efecto solvente sobre la velocidad de reacción
- Efecto de la temperatura sobre la velocidad de reacción
- 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**

- Inscripción: podrán inscribirse y cursar como regulares los estudiantes que hayan regularizado Química-Física II y Química Orgánica II.
- Trabajos Prácticos: la asistencia a trabajos prácticos es obligatoria. Para regularizar el curso los estudiantes deberán cumplir con los siguientes requisitos:
  - Haber asistido al 80% de las clases Prácticas.
  - Haber realizado la totalidad de los Trabajo Prácticos de Laboratorio.
- 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 aprueba con una calificación mínima de siete (7) puntos.
- 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 - Bibliografía Complementaria

- [1] \* Oxidative degradation of norfloxacin by a lipophilic oxidant, cetyltrimethylammonium permanganate in water-acetonitrile medium: 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 chloraurate(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**

| <b>ELEVACIÓN y APROBACIÓN DE ESTE PROGRAMA</b> |                             |
|--|-----------------------------|
|  | <b>Profesor Responsable</b> |
| Firma:   |                             |
| Aclaración:                                    |                             |
| Fecha:   |                             |