

UNIVERSIDAD NACIONAL DE CUYO
Instituto de Ciencias Básicas
Licenciatura en Ciencias Básicas
Orientación: Química
Plan de Estudios 2005-Ord. 129/04-C.S. y Ord. 39/11-C.S.
Espacio Curricular:

QUÍMICA FÍSICA II
Año 2013

Docente Responsable: Dr. Mario Rodriguez
Docente Colaborador: Dr. Mario G. del Pópolo
Crédito Horario Total: 112 horas

1- OBJETIVOS Y EXPECTATIVAS DE LOGRO

- Adquirir conocimientos básicos de química cuántica, espectroscopía, mecánica estadística y de la teoría de las velocidades de reacción.
- Conocer el comportamiento de los sistemas macroscópicos que gobiernan la fisicoquímica y sus transformaciones mediante el estudio de situaciones de no-equilibrio.
- Desarrollar las habilidades y competencias en la resolución de situaciones problemáticas planteadas en los diferentes sistemas estudiados.
- Interpretar el concepto de cinética química en diferentes sistemas y condiciones como así también la importancia de sus aplicaciones.
- Manipular en forma apropiada el instrumental de laboratorio y adquirir las destrezas necesarias para el correcto desempeño de las actividades desarrolladas en el mismo.
- Utilizar sistemas de representación gráfica y analítica, aplicando modelos de simulación simple de los procesos estudiados.

2- CONTENIDOS ANALÍTICOS

UNIDAD 1: MECÁNICA CUÁNTICA

Radiación del cuerpo negro y cuantización de la energía. Fotones y efecto fotoeléctrico. Hipótesis de De Broglie. Principio de incertidumbre. Fundamentos de la mecánica cuántica. La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. Partícula en una caja unidimensional. Partícula en una caja tridimensional. Degeneración. Operadores. El oscilador armónico unidimensional. El rotor rígido de dos partículas. Métodos aproximados.

UNIDAD 2: ESTRUCTURA ATÓMICA Y MOLECULAR

Átomo de hidrógeno. El spin del electrón. Átomo de helio y el principio de Pauli. Átomos multielectrónicos y tabla periódica. Enlaces químicos. La aproximación de Born-Oppenheimer. La molécula-ion de hidrógeno. Método de los Orbitales Moleculares (OM). Funciones de onda Hartree-Fock y de interacción de configuración.

UNIDAD 3: ESPECTROSCOPÍA Y FOTOQUÍMICA

Radiación electromagnética. Espectroscopía. Rotación y vibración de moléculas.

Espectros rotacionales y vibracionales de moléculas diatómicas. Rotación y vibración de moléculas poliatómicas. Espectroscopía infrarroja, Raman, electrónica y de resonancia magnética.

UNIDAD 4: MECÁNICA ESTADÍSTICA

Macroestados y microestados. Ensamblados estadísticos. Ensamblados microcanónico y canónico. Distribución de velocidades en una dimensión. La distribución de Maxwell de rapidez molecular. Valores comparativos de la distribución de la rapidez: v_{med} , v_{mp} , y v_{ms} . Ley de distribución de Boltzmann. Función de partición. Función de partición molecular. Función de partición total. Función de partición traslacional. Función de partición rotacional. Función de partición vibracional. Función de partición electrónica. Funciones de partición para determinar cantidades termodinámicas. Equilibrio químico. Teoría del estado de transición.

UNIDAD 5: TEORÍA DE LAS VELOCIDADES DE REACCIÓN

Teoría de las colisiones. Frecuencia y requerimientos. Superficies de energía potencial. Teoría del estado de transición. Ecuación de Eyring. Aspectos termodinámicos. Dinámica de las colisiones moleculares. Transferencia de electrones en sistemas homogéneos.

UNIDAD 6: CINÉTICA DE LAS REACCIONES HOMOGÉNEAS. MODELOS CINÉTICOS

Cinética química. Clasificación de las reacciones. Variables que afectan a la velocidad de reacción. Definición de la velocidad de reacción. Factor dependiente de la concentración en la ecuación cinética. Reacciones simples y múltiples. Reacciones elemental y no elemental. Punto de vista cinético del equilibrio en reacciones elementales. Molecularidad y orden de reacción. Coeficiente cinético k . Representación de la velocidad de reacción. Modelos cinéticos para reacciones no elementales. Ensayo con modelos cinéticos.

UNIDAD 7: EFECTO DE LA TEMPERATURA EN LA ECUACIÓN CINÉTICA

Factor dependiente de la temperatura en la ecuación cinética. Dependencia de la temperatura según la ecuación de Arrhenius. Dependencia de la temperatura según la termodinámica. Dependencia de la temperatura a partir de la teoría de colisión. Dependencia de la temperatura a partir de la teoría del estado de transición. Comparación de ambas teorías. Comparación de las teorías con la ecuación de Arrhenius. Energía de activación y dependencia de la temperatura.

UNIDAD 8: INTERPRETACIÓN DE LAS LEYES DE VELOCIDAD

Reacciones elementales. Reacciones elementales consecutivas. Predicción de la velocidad. Reacciones unimoleculares. Mecanismos. Cinética de las reacciones complejas. Reacciones en paralelo. Reacciones en serie. Reacciones sucesivas irreversibles de diferentes órdenes. Reacciones reversible en serie o en paralelo. Reacciones en serie-paralelo. Reacciones en cadena. Leyes de velocidad. Cinética de polimerización.

UNIDAD 9: CATÁLISIS HOMOGÉNEA, ENZIMÁTICA Y HETEROGÉNEA

Catálisis homogénea. Características. Enzimas. Propiedades cinéticas de las enzimas. Mecanismo de Michaelis-Menten. Regulación. Eficiencia. Ecuación de Lineweaver-Burk. Unión del sustrato y acción enzimática. Sitios activos. Catálisis general ácido-base. Catálisis mediadas por iones metálicos. Catálisis covalente. Inhibición enzimática. Aplicaciones. Fotoquímica. Mecanismos de la catálisis heterogénea. Actividad catalítica en superficies. Catálisis e industria química.

UNIDAD 10: CINÉTICA DE LAS REACCIONES HETEROGÉNEAS

Características de las reacciones heterogéneas. Presencia de una interfase. Naturaleza de la interfase. Área y geometría de la interfase. Capa de película. Efecto de la velocidad del fluido. Efecto de la temperatura. Efecto de la concentración de reactivo.

Comportamiento electroquímico de reacciones heterogéneas. Nucleación. Reacciones autocatalíticas. Efecto de los productos de reacción. Uso de softwares en cinética de reacciones heterogéneas.

TRABAJOS PRÁCTICOS DE LABORATORIO

1. Laboratorio de computación 1: cuántica y espectroscopía
2. Laboratorio de computación 2: mecánica estadística y dinámica química
3. Laboratorio de computación 3: resolución de ecuaciones diferenciales acopladas en cinética química.
4. Efecto de la concentración y de la temperatura sobre la velocidad de reacción.
5. Hidrólisis enzimática.

3- BIBLIOGRAFÍA

1. O. Levenspiel, "Ingeniería de las reacciones químicas" Ed. Repla S.A. (1987).
2. J. M. Smith, "Ingeniería de la Cinética química", Ed. Continental S.A. (1991).
3. Fathi Habashi, "Principles of Extractive Metallurgy", Volume 1. Ed. Gordon and Breach (1980).
4. P. Atkins y J. de Paula, "Química Física" Ed. Panamericana 8va. Edición (2008).
5. G. Castellan, "Fisicoquímica", Ed. Addison, Wesley Longman 2da. Edición (1998).
6. R. Chang, "Fisicoquímica", Ed. Mc Graw Hill 3ra. Ed. (2008).
7. T. Engel y P. Reid, "Química Física", Ed. Pearson Addison Wesley (2006).
8. K. Laidler y J. Meiser, "Fisicoquímica". Ed. CECSA, México 6ta. Edición (2005).
9. I. Levine, "Fisicoquímica", Ed. Mc Graw Hill Volumen I 5ta. Ed. (2004).
10. I. Levine, "Fisicoquímica", Ed. Mc Graw Hill Volumen II 5ta. Ed. (2004).

4- METODOLOGÍA DE ENSEÑANZA Y DE EVALUACIÓN DURANTE EL CURSADO

METODOLOGÍA

El desarrollo de los temas se efectuará utilizando los siguientes recursos:

- Exposición de contenidos conceptuales en clases teóricas.
- Resolución de problemas en clases prácticas de aula.
- Desarrollo de experiencias en clases prácticas de laboratorio.

EVALUACIÓN

Para realizar la evaluación del aprendizaje de los contenidos y de los procedimientos se realizaran:

- Cuestionarios de clases de laboratorios: Serán evaluados durante el práctico correspondiente, de manera escrita u oral. Se contará con dos instancias de recuperación.

- Tres exámenes parciales, cuyos contenidos versarán sobre temas analizados previamente durante las clases de teoría y de práctica. Se contará con tres instancias de recuperación, las cuales el alumno utilizará según su necesidad.

6- CONDICIONES DE REGULARIDAD TRAS EL CURSADO

Para acreditar regularidad en la asignatura, el alumno deberá cumplir con lo siguiente:

- Asistencia obligatoria al 70% de las clase teóricas - prácticas.
- Aprobación del 100 % de los trabajos prácticos de laboratorio.
- Aprobación del 100 % de los exámenes parciales.

7- SISTEMA DE APROBACIÓN Y PROMOCIÓN DE LA ASIGNATURA

Aquellos alumnos que acrediten regularidad en la asignatura, cumpliendo con los requisitos previamente expuestos, estarán en condiciones de rendir un examen final para lograr la aprobación de la misma.

El examen final será integrador, basado en el programa de la materia, guía de estudios y bibliografía. El mismo constará de dos instancias, una escrita y otra oral.

Los alumnos que no cumplan con las condiciones establecidas, serán considerados alumnos no regulares y tendrán acceso a rendir examen final de la asignatura en calidad de alumnos libres.

Para acreditar el Espacio Curricular en calidad de alumnos libres, deberán aprobar los trabajos práctico de laboratorio y un examen escrito de todos los temas incluidos en el programa vigente, luego pasarán a una instancia oral.

8- SISTEMA DE CALIFICACIÓN

El sistema de calificación de la asignatura se regirá de acuerdo a lo establecido en la ordenanza Nro. 108 de la Universidad Nacional de Cuyo. Se regirá por una escala ordinal, de calificación numérica, en la que el mínimo exigible para aprobar equivaldrá al SESENTA POR CIENTO (60%). Este porcentaje mínimo se traducirá, en la escala numérica, a un SEIS (6). Las categorías establecidas refieren a valores numéricos que van de CERO (0) a DIEZ (10) fijándose la siguiente tabla de correspondencias:

Resultado	Escala Numérica	Escala Porcentual
NO APROBADO	Nota	%
	0	0%
	1	1 a 12%
	2	13 a 24%
	3	25 a 35%
	4	36 a 47%
	5	48 a 59%

Resultado	Escala Numérica	Escala Porcentual
APROBADO	6	60 a 64%
	7	65 a 74%
	8	75 a 84%
	9	85 a 94%
	10	95 a 100%

Cuando la primera (1ª) cifra decimal, en la escala porcentual, sea de CINCO (5) o más, se aproximará al valor entero inmediato superior.