

PROGRAMA			
Espacio Curricular:	Química Física II (Q209)		
Carácter:	Obligatoria	Período:	1º Semestre
Carrera/s:	Licenciatura en Ciencias Básicas con Orientación en Química		
Profesor Responsable:	Mario H. Rodriguez		
Equipo Docente:	Alexander C. Resentera		
Carga Horaria: 112 Hs (indicar horas teóricas y horas prácticas); 50% Teoría y 50% Práctica			
Requisitos de Cursado:	Tener regularizada Química Física (Q204)		

1-EXPECTATIVAS DE LOGRO

Conocer el comportamiento de los sistemas macroscópicos que gobiernan la fisicoquímica y sus transformaciones mediante el estudio de situaciones de equilibrio.
Interpretar el concepto de cinética química en diferentes sistemas y condiciones como así también la importancia de sus aplicaciones.
Utilizar sistemas de representación gráfica y analítica, aplicando modelos de simulación simples de los procesos estudiados.

2-DESCRIPTORES

Cinética de la reacción. Efecto de concentración y temperatura. Constante específica. Ecuación cinética, métodos de determinación. Orden y molecularidad. Reacciones simples y compuestas. Elementales y no elementales. Reacciones homogéneas, heterogéneas y catalíticas. Dinámica de las reacciones moleculares. Fisicoquímica de superficies. Isoterma de reacción.

3-CONTENIDOS ANALÍTICOS

UNIDAD 1: 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 2: 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 3: 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 4: CINÉTICA DE LAS REACCIONES HETEROGÉNEAS

Características de las reacciones heterogéneas. Presencia de una interfase. Naturaleza de la interfase. Área y geometría de la interfase, espesor de la 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.

UNIDAD 5: 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 6: GENERALIDADES SOBRE ELECTROCATÁLISIS

Celda electroquímica, generalidades y materiales. La interfaz electrodo/electrólito en equilibrio. Distribución de potencial y carga en la interfaz. Reacciones electroquímicas bajo condiciones de equilibrio. La interfaz electrodo/electrólito bajo condiciones de reacción. Potencial y distribución de carga en la interfaz. La reactividad y estructura electrónica de materiales con actividad electrocatalítica. Quimisorción en metales.

UNIDAD 7. METALES CON ACTIVIDAD ELECTROCATALÍTICA.

Formación de fases sobre electrodos. Fundamentos termodinámicos. Cinética de la nucleación electroquímica, modelo clásico. Determinación de las velocidades de nucleación. Actividad electrocatalítica de partículas metálicas depositadas sobre carbono, polímeros conductores y otros materiales con gran área específica. Deposición de metales del grupo del platino. Nanopartículas modificadas por codeposición, aleaciones y deposición subpotencial. Nanopartículas soportadas sobre polímeros conductores.

UNIDAD 8. ÓXIDOS MIXTOS DE METALES DE TRANSICIÓN.

Óxidos metálicos y estructuras. Perovskitas; Espinelas. Pirocloros. Reacciones electrocatalíticas de interés. Síntesis de óxidos mixtos. Métodos: cerámico; de coprecipitación; crioquímicos; de intercalación; sol-gel; hidrólisis de alcóxidos metálicos; electroquímicos. Preparación de electrodos. Estabilidad electroquímica. Electrocatalisis. Propiedades electrocatalíticas de perovskitas; espinelas; Co_3O_4 ; Mn_3O_4 ; Fe_3O_4 .

CAPÍTULO 9. DISPOSITIVOS PRIMARIOS Y SECUNDARIOS.

Baterías primarias. Generalidades. Baterías para equipos en miniatura. Baterías para equipos portables. Baterías secundarias. Generalidades. Baterías de plomo-ácido. Baterías de níquel-cadmio. Baterías de níquel-hidruro metálico; plata-zinc; plata-cadmio; níquel-zinc e ion litio.

UNIDAD 10. ELECTROQUÍMICA Y MEDIO AMBIENTE

Generalidades. Detección y mecanismo degradación o eliminación de sustancias contaminantes. Reactores para tratamiento de desechos contaminantes. Procesos de eliminación de contaminantes directos e indirectos. Oxidaciones y reducciones directas e indirectas. Procesos híbridos para el tratamiento de desechos acuosos.

CAPÍTULO 11. ELIMINACIÓN DE CONTAMINANTES MEDIANTE FOTOCATÁLISIS.

Aspectos generales de la fotocatalisis heterogénea. Procesos químicos en la interfaz partícula de semiconductor-electrólito. Aspectos cinéticos de la fotocatalisis. Oxidación fotocatalítica de algunos contaminantes inorgánicos. Eliminación fotocatalítica de metales pesados. Destrucción de contaminantes orgánicos mediante partículas semiconductoras. Fotocatalisis en fase gaseosa. Desactivación de los fotocatalizadores.

4-BIBLIOGRAFÍA

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

5-METODOLOGÍA DE ENSEÑANZA

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

6- EVALUACIÓN DURANTE EL CURSADO Y CONDICIONES DE REGULARIDAD

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 FINAL Y/O PROMOCIÓN DEL ESPACIO CURRICULAR

Los alumnos que lo deseen podrán optar por el sistema de promoción para lo cual deberán satisfacer los siguientes requisitos:

- Aprobación del 100% de los prácticos, guías de estudios y problemas que se realicen.
- Aprobar en primera instancia, con más del 70%, todos los exámenes parciales.

Los alumnos que aprueben el 100% de los prácticos y uno o más exámenes parciales con menos del 70%

y más del 60% quedarán en condición de "alumno regular". 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. Este examen final será en forma oral e integrador, basado en el programa de la materia, guía de estudios y bibliografía.

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. El sistema de calificación de la asignatura se regirá de acuerdo a lo establecido en el Art. 4° de la ordenanza N° 108/2010 CS de la Universidad Nacional de Cuyo. La cual prevé 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:

<i>Resultado</i>	<i>Escala Numérica Nota</i>	<i>Escala Porcentual %</i>
<i>No Aprobado</i>	0	0 %
	1	1 a 12 %
	2	13 a 24 %
	3	25 a 35 %
	4	36 a 47 %
<i>Aprobado</i>	5	48 a 59 %
	6	60 a 64 %
	7	65 a 74 %
	8	75 a 84 %
	9	85 a 94 %
	10	95 a 100%

PROMOCIONABLE

X

Fecha: ___/___/___

Profesor Responsable:.....

Firma:.....