

PROGRAMA - AÑO 2023			
<b>Espacio Curricular:</b>	Química Física II (Q209)		
<b>Carácter:</b>	Obligatorio	Período	1º Semestre
<b>Carrera/s:</b>	Licenciatura en Ciencias Básicas con Orientación en Química		
<b>Profesor Responsable:</b>	Mario Rodriguez		
<b>Equipo Docente:</b>	Alexander C. Resentera		
<b>Carga Horaria:</b> 112 horas, 48 horas teóricas y 64 horas de práctica (aula y laboratorio)			
<b>Requisitos de Cursado:</b>	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 no equilibrio. Interpretar el concepto de cinética química en diferentes sistemas y condiciones como así también la importancia de sus aplicaciones. Adquirir los conceptos básicos de los mecanismos de transporte de cantidad de movimiento, calor y materia que controlan la velocidad de los procesos y operaciones unitarias. Abordar un estudio fenomenológico y analítico de los mecanismos físicos que determinan los flujos de cantidad de movimiento, calor y materia. Utilizar sistemas de representación gráfica y analítica, aplicando modelos de simulación simples de los procesos estudiados.

### 2-DESCRIPTORES

Cinética de 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. Isotherma de reacción. Introducción a los procesos de transporte. Balance Macroscópico de Materia. Ley de Conservación de la Masa. Ecuación de Continuidad. Ley de La Conservación de la Energía. Fluidos ideales. Fluidos Reales. Régimen Laminar y Turbulento. Principios de Transferencia de Cantidad de Movimiento. Viscosidad. Modos de transferencia de calor. Transferencia de masa. Difusión molecular. Flujo por difusión. Ley de Fick. Difusión en gases, líquidos y sólidos.

### 3-CONTENIDOS ANALÍTICOS

#### UNIDAD 1: CINÉTICA DE LAS REACCIONES HOMOGÉNEAS. MODELOS CINÉTICOS

Cinética química. Clasificación de las reacciones. Definición de la velocidad de reacción. Variables que afectan a 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 las reacciones elementales. Molecularidad y orden de reacción. Coeficiente cinético k. Representación de la velocidad de reacción. Modelos cinéticos para reacciones no elementales. Ensayos 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 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 reversibles 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.

### 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. Inhibición enzimática. Catálisis general ácido-base. Catálisis mediadas por iones metálicos. Catálisis covalente. Aplicaciones. 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;  $\text{Co}_3\text{O}_4$ ;  $\text{Mn}_3\text{O}_4$ ;  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ .

### 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.

### UNIDAD 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. F. 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).
11. A. I. Arvia. Introducción a la Electrocatálisis. Washington Organización de los Estados Americanos, OEA (2009).
12. N. Vante. Electroquímica y Electrocatálisis. Ia y Ib. Ed. e-libro.net, Buenos Aires (2003).

#### 5-METODOLOGÍA DE ENSEÑANZA Y 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 realizarán:

- 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- 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 clases teóricas - prácticas.
- Aprobación del 100% de los trabajos prácticos de laboratorio.
- Aprobación del 100% de los exámenes parciales.

#### 7- SISTEMA DE APROBACIÓN 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 el 80% o más, todos los exámenes parciales.

Los alumnos que aprueben el 100% de los prácticos y uno o más exámenes parciales con menos del 80% y el 60% o más, quedarán en condición de "alumno regular".

Aquellos alumnos que acrediten regularidad en el Espacio Curricular, 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 prácticos de laboratorio, un examen escrito sobre la parte práctica aula y un examen oral integrador sobre los aspectos teóricos incluidos en el programa vigente.

El sistema de calificación del Espacio Curricular 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:

Resultado	Escala Numérica Nota	Escala Porcentual %
No Aprobado	0	0 %
	1	1 a 12 %
	2	13 a 24 %
	3	25 a 35 %
	4	36 a 47 %
Aprobado	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**

SI X NO



Dirección de Química, Lic. en Cs. Básicas

Jorgelina ALTAMIRANO

2023/03/09



Mario H. RODRIGUEZ  
 FIRMA Y ACLARACIÓN

DEL RESPONSABLE DEL ESPACIO CURRICULAR