

FISICOQUÍMICA III (Cinética)

Se dicta en Facultad de Química

Requisitos previos:

Conocimientos previos y recomendados:

Se considera como imprescindible el conocimiento de la Termodinámica General y de la Termodinámica Química. Además se consideran como adquiridos los conocimientos previos requeridos en los cursos de Fisicoquímica I y de Fisicoquímica II.

Tener aprobado el curso y el examen de Fisicoquímica I y II.

Objetivo de la asignatura:

Se trata de un curso de Cinética Química, donde se estudian los parámetros fundamentales que determinan la velocidad de una reacción así como los diferentes tipos de catálisis, con ejemplos de aplicación de interés tecnológico.

Programa:

1.- Rapidez de las reacciones químicas (7.5 horas)

1.1.- Tratamiento empírico (total: 2.5 horas)

Definición de rapidez de reacción y factores de los que depende. Métodos experimentales de medida. Uso de propiedades aditivas.

1.2.- Reacciones elementales (total: 2.5 horas)

Orden y molecularidad. Reacciones de orden cero, uno y dos. Determinación del orden de reacción: métodos integral, diferencial, de aislamiento y de vida fraccionaria.

1.3.- Reacciones complejas (total: 2.5 horas)

Ecuaciones cinéticas para las reacciones opuestas, paralelas, sucesivas y combinaciones de ellas. Estudio de algunos ejemplos de aplicación.

Reacciones que no obedecen a ningún orden de reacción.

2.- Mecanismos de reacción (2.5 horas)

Métodos experimentales para su determinación. Algunas reglas generales.

Hipótesis del estado estacionario. Reacciones en cadena y reacciones explosivas. Ejemplos de aplicación. Cinética química y equilibrio termodinámico. El principio de la micro-reversibilidad.

3.- Influencia de la temperatura sobre la rapidez de la reacción (2.5 horas)

Ecuación de Arrhenius. Teoría del estado de transición o del complejo activado. Energía de activación. Métodos para su determinación. Superficies de energía potencial. Teorías de las colisiones y de la velocidad absoluta.

4.- Algunas reacciones con características especiales (2.5 horas)

4.1.- Reacciones rápidas (1.5 horas)

Generalidades. Métodos de relajación y de flujo detenido. Ejemplos de aplicación.

4.2.- Reacciones fotoquímicas (1 hora)

Estudio general. Fotosíntesis. Algunos ejemplos de aplicación.

5.- Reacciones en solución (2.5 horas)

Influencia del medio (constante dieléctrica y fuerza iónica) sobre la rapidez de los procesos iónicos. Efecto del solvente sobre la rapidez de

los procesos elementales no iónicos. Influencia de la presión sobre la rapidez de los procesos elementales.

6.- Reacciones catalizadas (17.5 horas)

6.1.- Introducción a la catálisis (1.5 horas)

Definiciones de catalizador y mecanismo general. Complejo de Arrhenius y complejo de van't Hoff. Ecuaciones cinéticas e influencia de la temperatura.

6.2.- Catálisis homogénea (2.5 horas)

Catálisis homogénea en fase gaseosa. Catálisis homogénea en solución.

Catálisis ácido-base específica y generalizada. Influencia del pH.

Autocatálisis.

6.3.- Catálisis enzimática (6 horas)

Generalidades sobre enzimas y mecanismos de reacción. Ecuación de Michaelis-Menten. Influencia del pH y de la temperatura. Inhibición competitiva, no competitiva y acompetitiva. Ejemplos de aplicación.

6.4.- Adsorción de gases sobre sólidos (3.5 horas)

Sólidos porosos. Adsorción de gases sobre superficies sólidas: fisisorción y quimisorción. Diferentes tipos de isotermas de fisisorción (Langmuir, Freundlich, B.E.T., etc). Isotermas de quimisorción: modelo de Langmuir (adsorción molecular, coadsorción y adsorción disociativa)

6.5.- Catálisis heterogénea (4 horas)

Catalizadores sólidos. Cinética de las reacciones en fase gaseosa con catalizador sólido. Modelos de Langmuir-Hinshelwood y de Eley-Rideal (reacciones mono y bimoleculares). Ejemplos de aplicación.

Carga horaria:

Carácter del curso: obligatorio.

Curso teórico: 2.5 horas semanales durante un semestre.

Curso práctico de laboratorio: 2.5 horas por semana.

Curso de problemas: 1 hora semanal.

Evaluación y ganancia del curso:

Curso de laboratorio: asistencia obligatoria y controles escritos y de prácticas de laboratorio.

Curso teórico: asistencia libre con examen final.

Docente responsable:

María A. Grompone.

Profesora Catedrática de Físicoquímica.

Facultad de Química.