



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

(Programa del año 2006)

I - Oferta Académica

| Materia | Carrera | Plan | Año | Período |
|-------------------|--------------|-------|-----|---------|
| QUIMICA FISICA II | LIC. QUIMICA | 24/84 | 3 | 2c |

II - Equipo Docente

| Docente | Función | Cargo | Dedicación |
|-----------------------------|-------------------------|-----------|------------|
| FERRETTI, FERDINANDO HECTOR | Prof. Responsable | P.TIT EXC | 40 Hs |
| BLANCO, SONIA ENCARNACION | Prof. Colaborador | P.ASO EXC | 40 Hs |
| GASULL, ESTELA ISABEL | Responsable de Práctico | JTP EXC | 40 Hs |
| SANCHO, MATIAS ISRAEL | Auxiliar de Práctico | A.2DA SIM | 10 Hs |
| ALMANDOZ, MARIA CRISTINA | Auxiliar de Laboratorio | 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 | 11 Hs |

| Tipificación | Periodo |
|--|----------------|
| B - Teoría con prácticas de aula y laboratorio | 1 Cuatrimestre |

| Duración | | | |
|------------|------------|---------------------|-------------------|
| Desde | Hasta | Cantidad de Semanas | Cantidad de Horas |
| 13/03/2006 | 16/06/2006 | 14 | 160 |

IV - Fundamentación

Para que los futuros profesionales químicos puedan disponer de todos los recursos y habilidades que se infieren desde las incumbencias especificadas para la Carrera de Licenciatura en Química, es claro que los estudiantes deben conocer y aprender diversos temas de naturaleza básica y aplicada. Entre ellos, son de importancia los que involucran conocimientos y leyes básicas que explican la ocurrencia de reacciones químicas y los mecanismos por los cuales tienen lugar. También debe destacarse la relevancia del uso de procedimientos teóricos y prácticos fundamentales de la Química Física Aplicada en general y de la Cinética de Reacción en particular, en la resolución de problemas propios de la Química. Los mencionados precedentemente, son los temas que esencialmente se enseñan en Química-Física II.

V - Objetivos

Utilizando una metodología de enseñanza teórico-práctica transversal, lograr que los Alumnos aprendan de forma amena y fácil, lo siguiente: a) Cuáles son los principales factores operativos involucrados en experimentos cinéticos; b) Cómo se formulan las ecuaciones empíricas de velocidad; c) De qué manera las teorías de velocidad más comunes ayudan a comprender y justificar la ocurrencia de las mismas; d) Cómo se establecen y cómo se analizan los mecanismos de reacción, en sistemas homogéneos y heterogéneos, químicos y biológicos. De este modo, se proporciona a los Alumnos, diversos

conocimientos y herramientas útiles para el desarrollo de Asignaturas profesionales posteriores, las cuales están estrechamente vinculadas con las incumbencias específicas de la Carrera de Licenciatura en Química.

VI - Contenidos

Tema 1. CINÉTICA DE REACCIONES ELEMENTALES.

Principios Básicos de Cinética de Reacción. Constante de velocidad específica. Molecularidad. Ejemplos de reacciones uni, bi y trimoleculares. La Ecuación de Velocidad Integrada. Orden de reacción. Orden de reacción verdadero y orden de reacción respecto del tiempo. Reacciones irreversibles de primer y segundo orden. Ecuaciones Cinéticas Simplificadas de Pseudo-Orden. Problemas de aplicación.

Tema 2. DETERMINACION NUMERICA DEL ORDEN Y CONSTANTE DE VELOCIDAD.

Orden de Reacción desde Ecuaciones Diferenciales de Velocidad. Derivación gráfica y analítica. Análisis de Datos: velocidades iniciales, series del tiempo y vida media. Medidas Experimentales. Análisis de reacciones de primer y segundo orden usando mediciones espectrofotométricas, conductimétricas y polarimétricas. Formación de complejos metálicos con o-hidroxi-benzofenonas. Problemas de aplicación.

Tema 3. CINÉTICA DE REACCIONES COMPLEJAS.

Reacciones Reversibles. Reacción con un sólo reactivo y un producto único. Reacción con un sólo reactivo y dos productos. Reacciones Paralelas. Casos de dos y tres reacciones laterales. Reacciones Consecutivas. Ecuaciones de velocidad. Métodos Aproximados para el Tratamiento de Reacciones Complejas. Nitración aromática en medio sulfúrico. Aproximación del pre-equilibrio. Aproximación del estado estacionario. Conclusiones.

Tema 4. TEORIAS DE REACCIONES QUIMICAS.

Influencia de la temperatura sobre velocidades de reacción y equilibrios químicos. Ley de Arrhenius: el complejo activado y la energía de activación. Teoría del Estado de Transición. Estructura de complejos activados. Entropías y entalpías de activación. Reacción bimolecular entre el yodo y el hidrógeno: aplicación de ambas teorías, conclusiones. Presión y Velocidad de Reacción. Volumen de activación de reacciones orgánicas. Problemas de aplicación.

Tema 5. EFECTOS DEL MEDIO DE REACCION.

La Estructura de Líquidos. Solvatación. Regiones cibotáticas. Hidratación de iones. Efectos solvente en cinética química y equilibrios químicos. Efectos Solvente sobre Velocidades Específicas. Interacciones electrostáticas y no electrostáticas, factores de frecuencia y carga de los iones reactivos. Análisis de la influencia del solvente mediante la teoría de Eyring. Influencia de la fuerza iónica: ecuación de Brønsted-Bjerrum, gráficos log k vs. fuerza iónica, desviaciones. Reacciones que involucran dipolos: efecto del solvente, expresión de Kirkwood, desviaciones. Problemas de aplicación.

Tema 6. MECANISMOS. CATALISIS HOMOGENEA.

Mecanismos de reacción. Sustituyentes y velocidad de reacción. La ecuación de Hammett. Aplicación de la ecuación de Hammett a reacciones de varias etapas. Separación de los efectos inductivo y de resonancia. Separación de los efectos estérico y electrónico. Catálisis: criterios de catálisis y funciones de un catalizador. Catálisis ácido-base. Catálisis ácido-base general y específica. Mecanismos de reacción de la hidrólisis de ésteres. Estudio de la interconversión de chalconas y flavanonas.

Tema 7. FENOMENOS DE INTERFASES.

Energía superficial y tensión superficial. Interfaces Líquido-Líquido y Sólido-Líquido. Adsorción de Gases por Sólidos. Adsorción física y química. Isotermas de Freundlich, Langmuir y BET. Aplicación: determinación del área específica de catalizadores. Adsorción de Solutos por Sólidos. Adsorción por sílica gel de no electrolitos en solventes orgánicos.

Tema 8. REACCIONES HETEROGENEAS.

Reacciones Superficiales. Mecanismo básico de las reacciones de superficie. Características generales. Etapas. Función de la superficie en la catálisis. Importancia de las velocidades iniciales. Reacciones Gas-Sólido. Reacción superficial de fragmentación unimolecular. Cambios del orden de reacción con la etapa determinante de la velocidad. Reacciones Superficiales Bimoleculares. Ecuación de velocidad general. Casos particulares. Reacciones Líquido-Sólido. Isomerización de flavanona e hidroxilación de flavona sobre alúmina. Reacciones en dos Fases Líquidas. Interconversión de 2'-hidroxichalconas en ciclohexano-alcohol acuoso.

Tema 9. VELOCIDAD DE DISOLUCION.

Soluciones de Sólidos no Electrólitos. Solubilidad. Velocidad de solución. Modelo físico. Primera ley de Fick de difusión. Ley de Velocidad de Noyes y Whitney. Variables que la afectan. Efecto de la temperatura: ecuación de Van't Hoff. Velocidad de solución de sustancias ácidas y básicas. Termodinámica del Proceso de Disolución. Interacciones soluto-solvente. Soluciones ideales y no ideales. Fuerza dipolo-dipolo. La unión hidrógeno. Aplicaciones: velocidad de disolución de flavona en etanol.

Tema 10. REACCIONES BIOLOGICAS.

Desarrollo de Microorganismos. Velocidad de crecimiento y muerte. Mecanismos de acción bacteriostática y velocidades de inhibición específica. Ejemplos. Actividad antimicrobiana de flavonoides y benzofenonas. Reacciones Enzimáticas. Actividad catalítica de las enzimas. Curvas de desarrollo. Dependencia con la concentración de sustrato: variación del orden del proceso cinético. Mecanismo de Michaelis-Menten. Influencia del pH y la temperatura. Aplicación: transformación enzimática de flavanona. Mecanismo de bioconversión. Inhibición Enzimática: competitiva, incompetitiva y no competitiva. Aplicaciones. Inhibición de xantina oxidasa por o-hidroxibenzofenonas.

VII - Plan de Trabajos Prácticos

A) TRABAJOS PRACTICOS EXPERIMENTALES.

1. ESTUDIO CINETICO DE UNA REACCION DE PSEUDO PRIMER ORDEN. VARIACION DE LA CONSTANTE ESPECÍFICA DE VELOCIDAD CON LA TEMPERATURA.

Objetivos:

- a) Facilitar el conocimiento de las leyes básicas de la cinética de reacción
- b) Determinación de la velocidad específica y del orden de reacción.
- c) Ilustrar la aplicación de un método volumétrico para realización de un estudio cinético.
- d) Analizar la variación de la constante específica de velocidad con la temperatura.

2. ESTUDIO CINETICO DE LA SINTESIS DE CHALCONA. INFLUENCIA DEL CATALIZADOR SOBRE LA VELOCIDAD DE REACCION.

Objetivos:

Mediante el uso de un método espectrofotométrico, llevar a cabo un estudio cinético, a realizar en dos jornadas de laboratorio, que comprende:

- a) Buscar las condiciones experimentales adecuadas para que se produzca la reacción planteada.
- b) La ejecución de cuatro o más corridas cinéticas variando la concentración del catalizador.
- c) El análisis de la influencia del catalizador sobre la constante de velocidad de la reacción directa.
- d) Establecer la influencia de la temperatura sobre la constante de equilibrio y evaluar los cambios de entalpía y entropía involucrados en la reacción.

3. SISTEMAS LIQUIDO-SOLIDO. ADSORCION E ISOMERIZACION DE FLAVANONA EN 2'-HIDROXICHALCONA.

Objetivos:

- a) Aplicar procedimientos espectrométricos y cromatográficos en la realización de estudios cinéticos heterogéneos.
- b) Proponer y analizar mecanismos de reacción heterogéneos.
- c) Examinar la función de la superficie del adsorbente.

4. CINETICA ENZIMATICA. ESTUDIO DE LA HIDROLISIS ENZIMATICA DEL ALMIDON

Objetivos:

Facilitar el aprendizaje e integración de los aspectos teóricos, experimentales y aplicados de temas tales como:

- a) Leyes básicas de la Cinética Enzimática.
- b) Tratamiento de datos cinéticos experimentales.
- c) Mecanismo de Michaelis-Menten.
- d) Determinación de la velocidad máxima de reacción y de la constante de Michaelis
- e) Determinación de la actividad de la amilasa en muestras naturales.

5. ADSORCION DE 4-N(CH₃)₂-CHALCONA EN CICLOHEXANO POR SILICA GEL.

Objetivos:

Facilitar el aprendizaje e integración de los aspectos teóricos, experimentales y aplicados de temas tales como:

- a) Conceptos básicos de fenómenos superficiales.
- b) Tratamiento de datos adsorptivos experimentales.
- c) Análisis de las isothermas de Freundlich y de Langmuir.
- d) Cálculo del volumen de las moléculas de adsorbato.

6. VARIACION DE LAS CONSTANTES DE EQUILIBRIO Y DE LAS VELOCIDADES DE REACCION CON LA

PERMITIVIDAD DEL MEDIO.

Objetivos:

- a) Ilustrar la preparación de soluciones buffer de fuerza iónica constante.
- b) Utilización de la ecuación de Henderson-Hasselbalch para la determinación del pKa de una sustancia en soluciones etanol-agua
- c) Aplicación de la ecuación de Kirkwood para analizar la influencia de la constante dieléctrica del medio sobre las constantes de velocidad y del valor del pKa.

B) TRABAJOS PRACTICOS DE AULA.

B.1. Resolución de Problemas de Aplicación sobre los diferentes temas de la Asignatura, con el objetivo de que el Alumno aprenda a:

- 1) Comprender ecuaciones y no a memorizarlas.
- 2) Leer el significado físico de los diferentes términos y signos algebraicos que aparecen en una ecuación.
- 3) Representar gráficamente ecuaciones, de forma que pueda ver la variación que se estudia.
- 4) Proponer problemas que involucren una determinada ecuación, resolverlos, volviendo una y otra vez sobre la ecuación hasta comprender su significado y aplicabilidad.

B.2. Diseño de un trabajo de investigación sobre los temas del Curso escogidos por los Alumnos. Esto implica realizar búsquedas bibliográficas (mediante procedimientos computacionales), estudio de las referencias obtenidas, planificación de los experimentos y elaboración de una monografía o material didáctico equivalente.

VIII - Regimen de Aprobación

REGLAMENTO INTERNO DE LA CATEDRA

Consideraciones generales.

1. Son Trabajos Prácticos los ejercicios, problemas, experimentos de laboratorio, exposiciones, búsquedas bibliográficas, etc., realizados en cantidad, calidad y forma que más convenga a la enseñanza de una asignatura, de manera que, conjuntamente con las clases teóricas, tiendan a la mejor formación del alumno.
2. Toda comunicación o citación de la Cátedra, horarios y fechas de Trabajos Prácticos, de problemas y exámenes parciales, o cualquier otra observación que fuera necesaria, se hará por medio del avisador de la misma.
3. Cada Comisión de Trabajos Prácticos estará constituida como máximo por cuatro alumnos.
4. El Personal Docente de la Asignatura establecerá oportunamente horas de consulta, en los días y horarios que convenga a la mayoría de los alumnos, para responder a las dudas vinculadas con la interpretación y/o realización de los diferentes Trabajos Prácticos.

Sobre la realización de los Trabajos Prácticos.

5. Antes de la realización de un trabajo experimental, todos los alumnos deberán responder a un cuestionario escrito sobre el

tema de trabajo. Sólo podrán realizar los experimentos aquellos alumnos que contesten satisfactoriamente el referido cuestionario.

6. En ningún caso los alumnos iniciarán un trabajo experimental sin la autorización previa del Jefe de TP. En caso contrario, cualquier daño al instrumental utilizado será responsabilidad de la Comisión, la cual estará obligada a costear su reparación.

7. Cada alumno dejará su sector de trabajo y el material utilizado en cada experiencia, en las mismas condiciones que le fuere entregado, guardando el orden y la limpieza en todas las operaciones.

8. Los Trabajos Prácticos de Aula consistirán en la resolución de problemas, aplicando los conocimientos desarrollados por el Personal Docente, de acuerdo al programa teórico de la Asignatura y/o al procesamiento de los datos experimentales obtenidos en el laboratorio.

9. Cada alumno deberá llevar dos cuadernos de anotaciones. Uno dedicado exclusivamente a los Trabajos Prácticos de Aula. El otro, a los Trabajos Prácticos de Laboratorio. En este último cuaderno el Alumno confeccionará previamente a cada Trabajo Práctico, un esquema de las operaciones a realizar y consignará en forma ordenada todos los valores experimentales que obtenga. Una vez finalizada la experiencia, realizarán los cálculos y las correspondientes gráficas, si fueran necesarios.

10. Los cuadernos de Trabajos Prácticos de Aula y de Laboratorio, deberán ser visados por el Jefe de Trabajos Prácticos toda vez que se complete un Trabajo. Se podrá rechazar el informe presentado a la firma, cuando no se haya cuidado el orden y/o los resultados obtenidos no fueran satisfactorios.

Sobre la aprobación de los Trabajos Prácticos.

11. Un Trabajo Práctico de Laboratorio, se dará por aprobado si el alumno cumple, con los requisitos siguientes: a) responde satisfactoriamente el cuestionario previo; b) realiza correctamente la parte experimental; c) presenta un informe ordenado, con las operaciones fundamentales, cuadro de valores, gráficas, errores cometidos, etc. Los valores obtenidos experimentalmente deben ser coherentes con los tabulados. De no satisfacerse estos requisitos, el alumno será considerado ausente.

12. Un Trabajo Práctico de Aula se dará por aprobado si el alumno cumple con los siguientes requisitos:

a) posee un conocimiento teórico mínimo de los problemas a resolver.

b) presenta un informe correcto.

Sobre las recuperaciones y aprobaciones de Trabajos Prácticos.

13. Para dar por satisfechos los Trabajos Prácticos de la materia, el alumno deberá aprobar el 100 % del plan ejecutado por la Cátedra.

14. El alumno tendrá una primera posibilidad de recuperar los Trabajos Prácticos en que hubiere resultado reprobado, a condición de que haya aprobado en Primera Instancia no menos del 50 % de los realizados por la Cátedra o su fracción entera menor. Tendrán derecho a una segunda recuperación sólo quienes hayan aprobado como mínimo el 80 % de los Trabajos Prácticos del plan mencionado, luego de la primera recuperación.

Sobre las exámenes parciales.

15. Durante el desarrollo del Asignatura, se tomarán tres parciales escritos sobre los Trabajos Prácticos, cuyas fechas se darán a conocer con 7 (siete) días de anticipación. Podrán rendir cada examen parcial aquellos alumnos que hayan realizado el 100 % de los Trabajos Prácticos de Laboratorio y de Aula, correspondientes a dicho parcial.

16. La Cátedra ofrecerá al alumno dos posibilidades de recuperación de exámenes parciales o sus equivalentes. Tendrá derecho a la primera recuperación el Alumno que en primera instancia haya aprobado un mínimo del 50 % (o su fracción entera menor) de los exámenes parciales o sus equivalentes del plan. Tendrán derecho a una segunda recuperación los

alumnos que hayan aprobado el 75% (o su fracción entera menor) de los exámenes parciales o sus equivalentes del mismo. La Cátedra considerará dentro de su crédito horario los días destinados a estas recuperaciones al final del plan del Asignatura.

Sobre las exámenes libres.

17. El Alumno que en condición de libre, se presente a rendir la Asignatura, deberá aprobar:

- a) un examen práctico.
- b) un examen teórico.

Del examen práctico:

Este constará de dos partes a saber:

A. Examinación sobre los Trabajos Prácticos de Aula.

El alumno deberá resolver satisfactoriamente, una serie de cinco problemas tipo, como los desarrollados a lo largo de la Asignatura.

B. Examinación sobre Los Trabajos Prácticos de Laboratorio.

Del conjunto de trabajos experimentales que forman parte del plan de Trabajos Prácticos de la materia, se seleccionará por sorteo uno de ellos. El alumno deberá realizarlo en forma total.

El examen práctico se dará por aprobado o no-aprobado. La aprobación del mismo, es condición 'sine qua nom' para poder pasar al examen teórico.

Del examen teórico:

Será de las mismas características que la evaluación por examen final, para los alumnos regulares.

OBSERVACIONES.

A) Sobre los cuestionarios previos a la realización de un Trabajo Práctico.

Dichos cuestionarios se rendirán en una jornada previa a la realización del Trabajo Práctico correspondiente. De resultar reprobado, el alumno podrá recuperarlo al comienzo de la jornada de ejecución del Trabajo Práctico o en la fecha asignada para su recuperación. Cualquiera sea el caso, siempre se tendrá presente el número de Trabajos Prácticos posibles de recuperar, de acuerdo al total de los realizados por la Cátedra.

B) Sobre los elementos con los cuales debe contar cada alumno.

Durante el desarrollo de los Trabajos Prácticos los alumnos deberán contar con los elementos necesarios para hacer efectivo el trabajo individual: cuaderno o carpeta, elementos de dibujo y escritura, papel milimetrado, calculadora, etc. En particular, el alumno deberá presentarse al laboratorio de la Cátedra con un guardapolvo y un elemento de limpieza (repassador o similar).

C) Sobre los informes previos y finales.

Se presentará un informe previo antes de comenzar la ejecución de cada Trabajo Práctico de Laboratorio y en él se consignarán:

Los fines perseguidos.

La fundamentación de los métodos escogidos para las mediciones experimentales, incluyendo de ser posible, un esquema del equipo a utilizar.

Las operaciones a realizar, en forma esquemática.

Las posibles conclusiones a las que supuestamente se podrían arribar.

En los informes finales se consignarán cálculos, tablas de valores experimentales, gráficos y conclusiones, en forma ordenada y clara, para ser presentados al Jefe de Trabajos Prácticos para su visado y aceptación.

D) Sobre los exámenes parciales y sus recuperaciones.

El alumno podrá optar por rendir los exámenes parciales en primera instancia en las fechas que se comunicarán durante el periodo lectivo o al final del mismo, sin perjuicio propio. Dado que habrá fechas para las tres examinaciones parciales al final del Asignatura (aparte de las recuperaciones), se aclara que ningún alumno podrá efectuar la primera recuperación de un examen parcial sin haber rendido en primera instancia los tres que establece el plan. Por otra parte, aquellos alumnos que estén en condiciones reglamentarias de hacerlo, podrán adelantar las recuperaciones dentro de las fechas antes mencionadas, teniendo en cuenta el examen parcial que se rinde en cada una de ellas. Por el contrario, no se podrán rendir exámenes parciales en primera instancia dentro de las fechas destinadas a las recuperaciones; dichas fechas revisten el carácter nominado: recuperaciones. En las mismas no se podrá rendir más de un examen parcial por día.

IX - Bibliografía Básica

[1] 1) LIBROS.

[2] * 'Organic Reactions. Equilibria, Kinetics and Mechanism'. F. Ruff and I.G. Csizmadia. Elsevier, London, 1994.

[3] * 'Physical Chemistry'. P. W. Atkins. 6th ed., Oxford University Press, USA, 1998.

[4] * 'Chemical Kinetics'. Keith J. Laidler. 3rd ed. Harper-Collins. NY, 1987.

[5] * 'Mechanism in Organic Chemistry'. P. Sykes, Longman, England, 1997.

[6] * 'Physical Organic Chemistry'. 2nd ed., N. Isaacs, Longman, England, 1995.

[7] * 'Physical Chemistry of Surfaces'. A. W. Adamson. 5th ed., Wiley & Sons, USA, 1990.

[8] * 'Fisicoquímica'. G. W. Castellan, Addison-Wesley Iberoamericana, USA, 1987.

[9] * 'Fisicoquímica para Biólogos'. J. G. Morris. Ed. Reverté. 1982.

[10] 2) PUBLICACIONES.

[11] * 'Kinetics and structural study on complexes of Al(III) with o-hydroxy-benzophenones', J. Molec. Struct

[12] (Theochem), 586(1-3) 177-192, 2002.

[13] * 'Synthesis and Structure of 4-X-Chalcones'. J. Molec. Struct. (Theochem), 428, 167-174, 1998.

[14] * 'A theoretical and experimental study of the formation mechanism of 4-X-chalcones by the Claisen-Schmidt

[15] reaction'. J. Molec. Struct. (Theochem), 503(3), 131-144, 2000.

[16] * 'A theoretical and experimental study of adsorption from dilute cyclohexane solutions of non-electrolytes: 4-X-

[17] chalcones on silica gel', J. Molec. Struct. (Theochem), 579(1), 121-137, 2002.

[18] * 'Kinetic Determination of pKa in 2-Hydroxychalcones', Tetrahedron Lett., 34(29), 4615-4618, 1993.

[19] * 'Adsorption of Simple Flavonoids. Heterogeneous Isomerization of Flavanone in 2'-Hydroxychalcone'. J. Colloid

[20] Interf. Sci., 180, 144-148, 1996.

[21] * 'Consideraciones Sobre el Significado de Algunas Constantes Fisicoquímicas'. Inf. Tecnol. (Chile), 8, 43-48, 1997.

[22] * 'A theoretical and experimental study on the solubility, dissolution rate, structure and dipolar moment of flavone in

[23] ethanol', J. Molec. Struct. (Theochem), 585(1-3), 1-13, 2002.

[24] * 'Conformation, hydrogen bonding and UV solvatochromic shifts of benzophenones in primary alcohols'

[25] J. Molec. Struct. (Theochem), 582(1-3), 91-105, 2002.

[26] * 'Antibacterial activity of flavonoids against methicillin-resistant Staphylococcus aureus strains'

[27] J. Theor. Biol., 205(2), 231-240, 2000.

[28] * Inhibition of Xanthine-Oxidase by 2,4-Dihydroxy-Benzophenone and 2,3,4-Trihydroxy-Benzophenone, Internet

[29] Electron. J. Mol. Des. 3, 684-703, 2004, <http://www.biochempress.com>.

[30] * K.J. Hall, T.I. Quickenden and D.W. Watts, J. Chem. Educ. 1976, 53, 493-494.

[31] * V. Thomsen, Phys. Teach. 1994, 32, 24-25.

[32] * A.D. Attie and R.T. Raines, J. Chem. Educ. 1995, 72, 119-124.

[33] * R.A. Day and A.L. Underwood, J. Chem. Educ. 1995, 72, 596-598.

[34] * R. Sorensen and N. Novak, Biochem. Educ. 1996, 24, 26-28.

[35] 3) OTROS.

[36] Guía de TP de Laboratorio y de Problemas de la Cátedra.

X - Bibliografía Complementaria

[1] 1) LIBROS.

[2] * 'Interfacial Forces and Fields: Theory and Applications (Surfactant Science Series, V. 85)', Jyh-Ping Hsu (Editor), [3] Marcel Dekker Inc., NY, 1999.

[4] * 'Particle and Surface Characterization Methods', R.H. Müller and W. Mehnert (Editor's), Medpharm Scientific [5] Publishers, Stuttgart, Germany, 1997.

[6] * 'Reactividad y Bioactividad de Flavonoides', Capítulo 15, pp 353-373. 'Temas Actuales de Química Cuántica' [7] Editores: J.M. Fernández Rico y J.M. García de la Vega. Ediciones UAM, Madrid 1998.

[8] 2) PUBLICACIONES.

[9] * Y. Marcus, 'The properties of organic liquids that are relevant to their use as solvating solvents,' Chem. Soc. [10] Rev., 22, 409 (1993).

[11] * W. Linert, 'Mechanistic and structural Investigations based on the isokinetic relationship', Chem. Soc. Rev., 429 [12] (1994).

[13] * T. Cseharti, E. Forgacs. 'Use of multivariate mathematical methods for evaluation of retention data matrices'. [14] Advances in Chromatography, 36, 1-63, (1996).

[15] * P. W. Carr. 'Solvatochromism, linear solvation energy relationships', Microchem. Journal, 48, 4-28 (1993).

[16] * 'Influencia del pH en la Transformación Microbiológica de Flavanona y 2-Hidroxichalcona por A. niger NRRL 3' [17] Rev. Microbiol., Sao Paulo, 21(2), 175-182, 1990.

[18] * 'Alternative Application of the Michaelis and Menten Equation on Enzyme-Catalized Reaction Analysis' [19] Com Biol (Bs Aires), 11(4), 321-355, 1993.

[20] * 'Acción de la Permitividad del Disolvente sobre la Disociación del Acido Pírico', An. Asoc. Quím. Argent., 83(3), [21] 129-134, 1995.

[22] * 'Conformational Equilibrium and Intramolecular Hydrogen Bond of 4'-X and 4-X substituted 2(OH) chalcones', [23] J. Molec. Struct. (Theochem), 493, 187-197, 1999.

[24] * 'Structure and UV solvatochromic shifts of sulfamethoxazole in alcoholic solvents and water',

[25] J. Molec. Struct. (Theochem), 582(1-3), 143-157, 2002.

XI - Resumen de Objetivos

Utilizar el crédito horario de 160h asignado (distribuido en 50h de clases teóricas y 110h de trabajos prácticos de laboratorio y de aula) para desarrollar los temas del Programa de la Asignatura, los cuales comprenden principalmente los fundamentos de la Cinética de Reacción y sus aplicaciones en diversos sistemas químicos y biológicos novedosos, homogéneos y heterogéneos. El objetivo primordial es enseñar conocimientos y leyes básicas que permiten explicar la ocurrencia de las reacciones químicas y los mecanismos por los cuales se verifican. Esto implica cumplimentar los siguientes objetivos parciales: a) Conocer los principales factores operativos involucrados en experimentos cinéticos; b) Formular ecuaciones empíricas de velocidad; c) Emplear las teorías de velocidad más comunes para comprender y justificar cómo suceden las reacciones químicas y biológicas. d) Proponer y analizar los mecanismos de reacción que sean pertinentes. De este modo, se espera contribuir a que los Alumnos aprendan de forma amena y fácil, diversos conceptos y herramientas propios de la Cinética de Reacción, que son imprescindibles para desarrollar Asignaturas profesionales posteriores estrechamente vinculadas con las incumbencias específicas de la Carrera de Licenciatura en Química.

XII - Resumen del Programa

Tema 1. CINÉTICA DE REACCIONES ELEMENTALES. Principios Básicos de Cinética de Reacción. La Ecuación de Velocidad Integrada. Ecuaciones Cinéticas Simplificadas de Pseudo-Orden.

Tema 2. DETERMINACION NUMERICA DEL ORDEN Y CONSTANTE DE VELOCIDAD. Orden de Reacción desde Ecuaciones Diferenciales de Velocidad. Mediciones Experimentales.

Tema 3. CINETICA DE REACCIONES COMPLEJAS. Reacciones Reversibles. Reacciones Paralelas. Reacciones Consecutivas. Métodos Aproximados para el Tratamiento de Reacciones Complejas.

Tema 4. TEORIAS DE REACCIONES QUIMICAS. Ley de Arrhenius. Teoría de la Colisión. Teoría del Estado de Transición. Presión y Velocidad de Reacción.

Tema 5. EFECTOS DEL MEDIO DE REACCION. La Estructura de Líquidos. Solvatación. Efectos Solvente sobre Velocidades Específicas. Reacciones que involucran dipolos.

Tema 6. MECANISMOS. CATALISIS HOMOGENEA. Mecanismos de reacción. Sustituyentes y velocidad de reacción. Catálisis, criterios de catálisis. Catálisis ácido-base.

Tema 7. FENOMENOS DE INTERFASES. Interfaces Líquido-Líquido y Sólido-Líquido. Adsorción de Gases por Sólidos. Adsorción de Solutos por Sólidos.

Tema 8. REACCIONES HETEROGENEAS. Reacciones Superficiales. Reacciones Gas-Sólido. Reacciones Superficiales Bimoleculares. Reacciones Líquido-Sólido. Reacciones en dos Fases Líquidas.

Tema 9. VELOCIDAD DE DISOLUCION. Soluciones de Sólidos no Electrólitos. Ley de Velocidad de Noyes y Whitney. Termodinámica del Proceso de Disolución.

Tema 10. REACCIONES BIOLOGICAS. Desarrollo de Microorganismos. Velocidad de crecimiento y muerte. Ejemplos. Reacciones Enzimáticas. Mecanismo de Michaelis-Menten. Inhibición Enzimática.

XIII - Imprevistos