



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
PROGRAMA DE
MAESTRÍA Y DOCTORADO EN CIENCIAS QUÍMICAS
MAESTRÍA EN CIENCIAS QUÍMICAS
Programa de actividad académica



Denominación: Cinética química			
Clave: 70181	Semestre: 1 - 4	Campo de conocimiento: Química	No. Créditos: 6
Carácter: Obligatoria de elección	Horas por semana		Total horas/ semana
	Tipo: Teórico	Teoría: 3	Práctica: 0
		Total horas/ semestre	3
Modalidad: CURSO		Duración del programa: Un semestre	
		Total horas/ semestre	48

Seriación: No (x) Si () Obligatoria () Indicativa ()

Actividad académica antecedente: Ninguna

Actividad académica subsecuente: Ninguna

Objetivo general:

El alumno aplicará los conceptos básicos de la cinética química en las reacciones y propondrá mecanismos de reacción que ejemplifiquen la reactividad de los sistemas bajo estudio.

Objetivos específicos:

Identificar las limitaciones de las reacciones bajo estudio para seleccionar la técnica apropiada y obtener los parámetros cinéticos que ayuden a la descripción completa de una reacción química.

Aplicar los conocimientos adquiridos en el curso para modificar las estructuras químicas bajo estudio y obtener los mejores rendimientos en los tiempos óptimos de sus reacciones.

Índice temático			
Unidad	Tema	Horas	
		Teóricas	Prácticas
1	Reacciones y velocidades de reacción	2	0
2	Reacciones con una forma cinética simple	4	0
3	Cinética de reacciones complejas-reacciones reversibles y concurrentes	6	0
4	Reacciones consecutivas e intermediarios de reacción	6	0
5	Deducción del mecanismo de reacción	6	0
6	Teorías cinéticas de las reacciones elementales	6	0
7	Reacciones en cadena	4	0
8	Reacciones en disolución	6	0
9	Reacciones a velocidades extremas	2	0
10	Pruebas extra-cinéticas para los mecanismos de reacción	6	0
Total de horas teóricas:		48	
Total de horas prácticas:		0	
Suma total de horas:		48	

Contenido Temático	
Unidad	Tema y subtemas
1	Reacciones y velocidades de reacción 1.1. Reacciones elementales y mecanismos de reacción 1.2. Orden de una reacción 1.3. Factores que influyen a las velocidades de reacción 1.4. Cinética experimental

	1.5. Serie de ejercicios
2	<p>Reacciones con una forma cinética simple</p> <p>2.1. Reacciones de primer orden y pseudo primer orden 2.2. Reacciones de segundo orden 2.3. Concentraciones equivalentes en las cinéticas de segundo orden 2.4. Uso de propiedades físicas en cinéticas de primer y segundo orden 2.5. Métodos cuando el punto final es desconocido 2.6. Otras formas cinéticas simples 2.7. Expresiones de la ley de velocidad y el método del exceso 2.8. Determinación experimental de los órdenes de la reacción 2.9. Expresiones de velocidad multi-término 2.10. Serie de ejercicios</p>
3	<p>Cinética de reacciones complejas-reacciones reversibles y concurrentes</p> <p>3.1. Reacciones reversibles de primer orden 3.2. Reacciones opuestas de orden mayor 3.3. Métodos de "Concentration-Jump" para equilibrios reversibles 3.4. Reacciones de intercambio 3.5. Reacciones paralelas y concurrentes de primer orden 3.6. Reacciones concurrentes de mezclas 3.7. Experimentos de competencia para determinar intermediarios de reacción 3.8. Serie de ejercicios</p>
4	<p>Reacciones consecutivas e intermediarios de reacción</p> <p>4.1. Reacciones consecutivas de primer orden 4.2. Soluciones duales en reacciones consecutivas 4.3. Reacciones consecutivas con un paso reversible 4.4. Aproximación del estado estacionario 4.5. Formas límite; el paso limitante de la reacción 4.6. Reacciones directas vs secuenciadas 4.7. Ecuaciones cinéticas para reacciones catalizadas por sustancias químicas y enzimáticas 4.8. Soluciones numéricas a las ecuaciones de velocidad 4.9. Serie de ejercicios</p>
5	<p>Deducción del mecanismo de reacción</p> <p>1.1. El complejo activado en el Estado de Transición 1.2. Interpretación mecanística de las leyes de velocidad 1.3. Expresiones cinéticas equivalentes 1.4. Procesos paralelos 1.5. Pasos sucesivos 1.6. Pre-equilibrio 1.7. Serie de ejercicios</p>
6	<p>Teorías cinéticas de las reacciones elementales</p> <p>1.1. Variación de la constante de velocidad con la temperatura 1.2. Desarrollo de la Teoría de las velocidades absolutas (del Complejo activado o Teoría de Eyring) 1.3. Conexiones entre la cinética y la termodinámica 1.4. El principio de reversibilidad microscópica 1.5. Serie de ejercicios</p>
7	<p>Reacciones en cadena</p> <p>7.1. Características de las reacciones en cadena 7.2. Reacciones fotoquímicas 7.3. La aproximación del estado estacionario de las reacciones en cadena 7.4. Reacciones oscilantes 7.5. Serie de ejercicios</p>
8	<p>Reacciones en disolución</p> <p>8.1. La naturaleza de las reacciones en un disolvente 8.2. Las velocidades de las reacciones controladas por difusión 8.3. Aplicaciones de la Teoría del Complejo Activado</p>

	8.4. Efectos del disolvente en reacciones polares y reacciones iónicas 8.5. Efectos salinos en reacciones iónicas de segundo orden 8.6. Efectos salinos y mecanismos de reacción 8.7. Influencia de la presión en las reacciones en disolución
9	Reacciones a velocidades extremas 9.1. Métodos experimentales para reacciones extremadamente rápidas 9.2. Métodos de flujo para reacciones rápidas 9.3. Métodos de relajación 9.4. Métodos de resonancia magnética: RMN y EPR 9.5. Método de "Flash- Fotólisis" 9.6. Método de radiólisis por pulsos
10	Pruebas extra-cinéticas para los mecanismos de reacción 10.1. Relaciones lineales de energía libre 10.2. Relación de Hammett 10.3. Relación de Marcus para transferencias electrónicas 10.4. Catálisis ácido base 10.5. Estereoquímica y el proceso de activación 10.6. Efectos isotópicos cinéticos. 10.7. Serie de ejercicios

Bibliografía básica actualizada:

1. Espenson, J. H. *Chemical Kinetics and Reaction Mechanisms*, 1st Ed., McGraw-Hill Book Company, New York, 1981.
2. Espenson, J. H. *Chemical Kinetics and Reaction Mechanisms*, 2nd Ed., McGraw-Hill, Inc., New York, 1995.
3. Wilkins, R. G. *Kinetics and Mechanism of Reactions of Transition Metal Complexes*, 2nd Ed., VCH, Weinheim Germany, 1991.
4. Frost, A. A. and Pearson, R. G. *Kinetics and Mechanism: A Study of Homogeneous Chemical Reaction*, 2nd Ed., John Wiley and Sons Inc., New York, 1961.
5. Laidler, K. J. *Chemical Kinetics*, 2nd Ed., TATA McGraw-Hill Publishing Company LTD, New Delhi, 1978.
6. Masel, R. I. *Chemical Kinetics & Catalysis*, 1st Ed., Wiley-Interscience, New York, 2001.
7. Marin, G. and Yablonsky, G. S. *Kinetics of Chemical Reactions: Decoding Complexity*, 1st Ed., Wiley-Interscience, New York, 2011.

Bibliografía complementaria:

1. Tobe, M. L. and Burgess, J. *Inorganic Reaction Mechanisms*, 1st Ed., Logman, New York. 1999.
2. Nash, L. K. *Elements of Statistical Thermodynamics*, 2nd Ed., Dover Books on Chemistry, 2006.
3. Lee, J.F., Sears, F.W. and Torcotte, D.L. *Statistical Thermodynamics*, 2nd Ed., Addison-Wesley Publishing Co. Massachusetts, 1973.

Sugerencias didácticas:		Mecanismos de evaluación del aprendizaje de los alumnos:	
Exposición oral	(X)	Exámenes parciales	(X)
Exposición audiovisual	(X)	Examen final escrito	(X)
Ejercicios dentro de clase	(X)	Trabajos y tareas fuera del aula	(X)
Ejercicios fuera del aula	(X)	Exposición de seminarios por los alumnos	(X)
Seminarios	(X)	Participación en clase	(X)
Lecturas obligatorias	(X)	Asistencia	(X)
Trabajo de investigación	(X)	Seminario	(X)
Prácticas de taller o laboratorio	()	Otras:	()
Prácticas de campo	()		
Otras: _____	()		

Línea de investigación:

Perfil profesiográfico: Maestro en Ciencias, contar con experiencia en el campo de conocimiento de la química y experiencia docente.