



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



Denominación: Métodos numéricos en química de disoluciones

Clave: 70185	Semestre: 1 - 4	Campo de conocimiento: Química	No. Créditos: 6	
Carácter: Obligatoria de elección		Horas por semana	Total horas/ semana	Total horas/ semestre
Tipo: Teórico		Teoría:	3	48
		Práctica:		
Modalidad: CURSO		Duración del programa: Un semestre		

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

Actividad académica antecedente: Ninguna

Actividad académica subsecuente: Ninguna

Objetivo general:

Aplicar métodos numéricos y programas computacionales a reacciones químicas en disoluciones acuosas y los parámetros asociados al equilibrio químico como medio de control de procesos y de generación y análisis de información analítica.

Objetivos específicos:

Estudiar sistemáticamente al equilibrio químico desde el punto de vista de balances de materia y carga.
Identificar diversas representaciones gráficas del equilibrio químico y crearlas a partir de métodos numéricos.
Utilizar la aproximación de condicionalidad del equilibrio para el tratamiento simplificado del equilibrio químico.
Aplicar las metodologías descritas en el análisis de algunos equilibrios heterogéneos.

Índice temático

Unidad	Tema	Horas	
		Teóricas	Prácticas
1	Fundamentación	9	0
2	Representaciones gráficas del equilibrio químico	12	0
3	Especies químicas en disolución	9	0
4	Tratamiento simplificado del equilibrio químico en sistemas multi-reactivos	9	0
5	Aplicaciones en equilibrios heterogéneos	9	0
Total de horas teóricas:		48	
Total de horas prácticas:		0	
Suma total de horas:		48	

Contenido Temático

Unidad	Tema y subtemas
1	<p>Fundamentación</p> <p>1.1. Equilibrio, actividad y solución de ecuaciones</p> <p>1.2. Tratamiento sistemático del equilibrio</p> <p>1.3. Resolución de sistemas de ecuaciones múltiples</p> <p>1.4. Leyes de conservación</p> <p>1.5. Balance protónico</p> <p>1.6. Cálculos de pH</p>

2	Representaciones gráficas del equilibrio químico 2.1. Diagramas de distribución, diagramas logarítmicos de concentraciones, función número medio, diagrama de predominio 2.2. Función continua de titulación 2.3. Métodos numéricos asociados a las representaciones
3	Especies químicas en disolución 3.1. Hidrólisis de iones metálicos 3.2. Complejos polinucleares y mixtos
4	Tratamiento simplificado del equilibrio químico en sistemas multi-reactivos 4.1. Condicionalidad del equilibrio principal y amortiguamiento del medio reaccional 4.2. Constantes condicionales de equilibrio
5	Aplicaciones en equilibrios heterogéneos 5.1. Solubilidad condicional 5.2. Intercambio iónico 5.3. Extracción líquido-líquido. Extracción de ácidos y cationes metálicos

Bibliografía básica actualizada:

1. De Levie, Robert. *How to Use Excell in Analytical Chemistry and in General Scientific Data Analysis*, Cambridge University Press, Cambridge, 2004.
2. Tremillon, Bernard. *Reactions in Solution: An Applied Analytical Approach*, J. Wiley, Chichester, 1997.
3. Holler, James. *Mathcad Applications for Analytical Chemistry*, Harcourt Brace College Publishers, Florida, 1994.
4. *Treatise on Analytical Chemistry. Part I Theory and Practice, Vol 2*. Kolthoff, I. M. and Elving, P. J. (Eds.), 2nd edition, John Wiley & Sons, New York, 1980.

Bibliografía complementaria:

Burgot, Jean-Louis. *Ionic Equilibria in Analytical Chemistry*, Springer, New York, 2012.

Sugerencias didácticas:

Exposición oral	(x)
Exposición audiovisual	()
Ejercicios dentro de clase	()
Ejercicios fuera del aula	(x)
Seminarios	()
Lecturas obligatorias	(x)
Trabajo de investigación	()
Prácticas de taller o laboratorio	()
Prácticas de campo	()
Otras: _____	()

Mecanismos de evaluación del aprendizaje de los alumnos:

Exámenes parciales	(x)
Examen final escrito	(x)
Trabajos y tareas fuera del aula	(x)
Exposición de seminarios por los alumnos	()
Participación en clase	()
Asistencia	()
Seminario	()
Otras:	()

Línea de investigación:

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