



FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES  
UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES



Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física

**CARRERA:** Doctorado / Posgrado

**CUATRIMESTRE:** Segundo

**AÑO:** 2012

**CODIGO DE CARRERA:** 51

**MATERIA:** Cinética Química

**CODIGO:** 5123

**PUNTAJE:** 5 (cinco)

**DURACIÓN:** cuatrimestral

**HORAS DE CLASE SEMANAL:**

- **Teóricas:** 5 hs.
- **Problemas:** 3 hs.

**TOTAL:** 8 hs.

**CARGA HORARIA TOTAL:** 128 hs.

**ASIGNATURAS CORRELATIVAS:** Licenciatura en Ciencias Químicas, Física, Biología y carreras afines

**FORMA DE EVALUACIÓN:** Dos exámenes parciales y un seminario o examen final.

**PROGRAMA ANALÍTICO:**

Mecanismos de reacción

Obtención de ecuaciones de velocidad complejas, métodos de aislamiento. Validez de la condición de estado estacionario. Análisis de mecanismos complejos. Planteo de mecanismos de reacción a partir de ecuaciones de velocidad experimentales. Modelado y simulación de mecanismos de reacción mediante métodos numéricos. Casos de estudio. Reacciones de combustión y de interés atmosférico.

Teoría de las reacciones químicas

Superficies de energía potencial, coordenada de reacción, complejo activado. Enfoque aleatorio de la cinética química. Ecuación maestra. Algoritmo de Gillespie. Reacciones unimoleculares en fase gaseosa (RRKM). Microheterogeneidad temporal y espacial. Constantes de velocidad dependientes del tiempo. Reacciones controladas por difusión. Efecto caja. Efectos de relajación del medio. Transferencia de energía electrónica. Variación de las constantes de velocidad con la densidad del medio: teorías de Lindemann y de Kramers.

CQ - 1/3

Dra. Lelia E. Dicelio  
Secretaría Académica de Grado  
D. Q. A. y Q. F.



FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES  
UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES



Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física

### Métodos generales

Forma de iniciación de reacciones químicas. Técnicas de seguimiento de reacciones cuasiestacionarias. Técnicas de flujo.

### Métodos de pulso

Reacciones lentas ( $> 1 \mu\text{s}$ ): fotólisis flash convencional y por reflectancia difusa. Reacciones rápidas ( $10 \text{ ps} - 1 \mu\text{s}$ ): excitación mediante pulsos de luz y técnicas de deconvolución. Reacciones ultrarápidas ( $< 10 \text{ ps}$ ): up-conversion, streak camera, efecto Kerr óptico. Time-correlated single photon counting. Fuentes de luz, detectores y electrónica.

### Métodos de modulación

Formas de excitación y métodos de análisis. Respuesta de un sistema en función de la frecuencia de excitación. Respuestas en fase y en frecuencia a excitación sinusoidal y de onda cuadrada. Técnicas de deconvolución. Detección de luminiscencia mediante amplificación lock-in. Análisis en el dominio de las frecuencias y en el dominio del tiempo.

### Métodos de relajación

Teoría de los métodos de relajación. Reacciones de primero y segundo orden. Modos de reacción. Método de flujo detenido y flujo acelerado. Salto de temperatura, de presión, de campo eléctrico y de solvente.

### Métodos de correlación

Fluctuaciones de sistemas en equilibrio. Difusión y procesos químicos. La integral de correlación. Instrumentación para correlación de fluorescencia. Estudios de procesos fotoquímicos, fotofísicos, asociación molecular y cambio conformacional. Análisis en el dominio temporal y de distribución de intensidades.

## Bibliografía

### General

- J. I. Steinfeld, J. S. Francisco, W. L. Hase, Chemical Dynamics and Kinetics, Prentice Hall, 1989
- B. G. Cox, Modern Liquid Phase Kinetics, Oxford University Press, 1994
- M. J. Pilling and P. W. Seakins, Reaction Kinetics, Oxford University Press, 1995
- M. Robson Wright, Introduction to Chemical Kinetics, Wiley, 2004
- K. A. Connors, Chemical Kinetics: The Study of Reaction Rates in Solution, Wiley, 1996

CQ - 2/3

Dra. Lella E. Dicelio  
Secretaría Académica de Grado  
D. Q. A. y Q. F.



FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES  
UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES



Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física

- F. Wilkinson, Chemical Kinetics and Reaction Mechanisms, 1980

Específica

- V. Ramamurthy, Photochemistry in constrained media, VCH, 1991.
- C. F. Bernasconi (Ed.), Investigation of Rates and Mechanisms of Reactions, en Techniques of Chemistry, Vol. VI, Part. II, Ed. A Weissberger, Wiley, 1986
- R.V. Bensasson, E.J. Land, T.G. Truscott, Excited States and Free Radicals in Biology and Medicine: Contributions from Flash Photolysis and Pulse Radiolysis, Oxford University Press, 1993
- W. Jost, H. Eyring, D. Henderson (Eds.), Physical Chemistry, an Advanced Treatise, Academic Press, 1970
- M. Eigen, L. De Mayer, Theoretical Basis of Relaxation Spectroscopy, Techniques of Chemistry, Vol. 6, 1973
- D. V. O'Connor, D. Phillips, Time-Correlated Single Photon Counting, Academic Press, 1984
- Ch. Zander, J. Enderlein, R. A. Keller (Eds.), Single molecule detection in solution, Wiley VCH, 2002.
- M. El Sayed, I. Tanaka, Y. Molin, Ultrafast Processes in Chemistry and Photobiology, Blackwell Science, 1995
- N. V. Tkachenko, Optical Spectroscopy: Methods and Instrumentations, Elsevier, 2006

Dra. Lelia E. Dicelio

Dr. Pedro Aramendía

Dr. Enrique San Román

Dra. Lelia E. Dicelio  
Secretaría Académica de Grado  
Q. A. y Q. F.



Universidad de Buenos Aires  
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Referencia Expte. N° 489.777/2007

VISTO:

Buenos Aires, 20 MAY 2013

la nota presentada por la Dra. Lelia E. Dicelio Secretaria Académica del Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física, mediante la cual eleva la información y el programa del curso de posgrado **CINÉTICA QUÍMICA**, que dictaron en el segundo cuatrimestre de 2012, el Dr. Enrique San Román, el Dr. Pedro Aramendía y la Dra. Lelia Dicelio

CONSIDERANDO:

lo actuado por la Comisión de Doctorado el 16/04/2013,  
lo actuado por la Comisión de Enseñanza, Programas, Planes de Estudio y Posgrado,  
lo actuado por este cuerpo en Sesión Ordinaria realizada en el día de la fecha,  
en uso de las atribuciones que le confiere el Artículo N° 113° del Estatuto Universitario,

EL CONSEJO DIRECTIVO DE LA FACULTAD DE  
CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES  
**RESUELVE:**

**Artículo 1°:** Dar validez al dictado del curso de posgrado **CINÉTICA QUÍMICA** de 128 hs. de duración.

**Artículo 2°:** Aprobar el programa del Curso de Posgrado **CINÉTICA QUÍMICA** obrante a fs 26 a 28

**Artículo 3°:** Ratificar un puntaje máximo de cinco (5) puntos para la Carrera de Doctorado.

**Artículo 4°:** Aprobar un Arancel de 20 Módulos. Disponer que los montos recaudados sean utilizados conforme a lo dispuesto por Resolución CD N° 072/03.

**Artículo 5°:** Comuníquese a la Dirección del Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física, a la Biblioteca de la FCEyN y a la Subsecretaría de Postgrado (con fotocopia del programa incluida (fs 26 a 28). Cumpido archívese.

Resolución CD N° 1002  
SP med 24/04/2013

DR. JORGE ALIAGA  
SECRETARIO