



NO FOLIAR
copie
QIN 2016
2

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES
UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES

Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física

CARRERA: Doctorado / Posgrado

CUATRIMESTRE: Segundo

AÑO: 2016

CODIGO DE CARRERA: 51

MATERIA: Cinética Química

CODIGO: 5123

PUNTAJE: 5 (cinco)

DURACIÓN: cuatrimestral

HORAS DE CLASE SEMANAL:

- **Teóricas:** 4 hs.
- **Problemas:** 4 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. Heterogeneidad temporal y espacial. Constantes de velocidad dependientes del tiempo. Reacciones controladas por difusión. Efecto caja. Efectos de relajación del medio. Transferencia de energía electrónica. Decaimiento multiexponencial y complejo. Tiempos de vida promedio (en amplitud e intensidad) para decaimientos complejos. Variación de

CQ - 1/3

Dra. M. GABRIELA LAGORIO
SECRETARIA ACADEMICA
DEPTO. QUIMICA INORGANICA
ANALITICA y QUIMICA FISICA



FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES

Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física

las constantes de velocidad con la densidad del medio: teorías de Lindemann y de Kramers.

Métodos generales

Forma de iniciación de reacciones químicas. Técnicas de seguimiento de reacciones cuasiestacionarias. Técnicas de flujo. Introducción sobre los métodos de pulso y modulación. La ecuación de convolución. Respuesta instrumental y ruido.

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. Moléculas individuales. Tiempos de residencia. Análisis en el dominio temporal y de distribución de intensidades. Instrumentación.

CQ - 2/3

Dra. M. GABRIELA LAGORIO
SECRETARIA ACADEMICA
DEPTO. QUIMICA INORGANICA
ANALITICA y QUIMICA FISICA



FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES
UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES

Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física

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
- F. Wilkinson, Chemical Kinetics and Reaction Mechanisms, 1980
- G. Martin, G. S. Yablonsky, Kinetics of Chemical Reactions, Wiley-VCH, 2011

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
- F. C. De Schryver, S. De Feyter, G. Schweitzer (Eds.), Femtochemistry, Wiley-VCH, 2001
- C. Gell, D. Brockwell. A. Smith. Handbook of single molecule fluorescence spectroscopy. Oxford University Press. 2006.

Dr. Pedro Aramendía

Dr. Enrique San Román

CQ - 3/3

Maria Gabriela Lagorio

Dra. M. GABRIELA LAGORIO
SECRETARIA ACADEMICA
DEPTO. QUIMICA INORGANICA
ANALITICA y QUIMICA FISICA



Universidad de Buenos Aires
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Referencia Expte. N° 489.777/07

Buenos Aires,

14 DIC 2015

VISTO:

la nota presentada por la Dr. M. Gabriela Lagorio, 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 será dictado en el segundo cuatrimestre de 2016 por el Dr. Enrique San Román y el Dr. Pedro Aramendía,

CONSIDERANDO:

lo actuado por la Comisión de Doctorado

lo actuado por la Comisión de 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°: Aprobar el curso de posgrado de **Cinética química** de 128 hs. de duración.

Artículo 2°: Aprobar el programa del curso de posgrado **Cinética química** obrante a fs 44 a 46 del expediente de la referencia.

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

Artículo 4°: Comuníquese a la Dirección del Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física, a la Biblioteca de la FCEyN (con fotocopia del programa incluida). Comuníquese a la Secretaría de Posgrado. Cumplido, archívese

Resolución CD N° 3095
SP ga 03/12/15


Dr. PABLO J. PAZOS
Secretario Adjunto de Posgrado
FCEyN - UBA


Dr. JUAN CARLOS REBOREDA
DECANO