Programa de la asignatura Cinética Química 2025

La materia de Cinética Química busca que los estudiantes integren principios de la **mecánica cuántica**, la **física**, el **análisis matemático** y el **álgebra** para comprender las teorías y los **métodos experimentales** más avanzados en este campo. El objetivo es que logren entender la **velocidad de las reacciones químicas** y sus mecanismos.

El curso abarca desde técnicas experimentales de vanguardia, como la **fotólisis de flash en el nanosegundo** y el uso de **láseres de femtosegundo** (femtoquímica), hasta el estudio de la **teoría de Marcus** para la transferencia electrónica, incluyendo la **región invertida de Marcus**.

Entre los conceptos clave que se desarrollan, se encuentran:

- La deducción de **coeficientes de velocidad** a través de la cinemática, dinámica y experimentos de haces moleculares.
- El análisis de los **efectos del solvente** en la cinética de reacciones en solución, abarcando el **efecto jaula** y el **control difusional**.
- La **cinética fotoquímica**, estudiando la **eficiencia cuántica**, constantes radiativas y no radiativas, y cómo los estados energéticos de reactivos y productos impactan la cinética.

Además de los conocimientos teóricos y experimentales, la materia enfatiza el desarrollo de habilidades esenciales. Se busca que los alumnos mejoren su **criterio experimental**, apliquen el **método científico** en el diseño de experimentos, y adquieran las **habilidades manuales** necesarias para el trabajo de laboratorio. También se fomenta el **análisis crítico** de modelos y resultados experimentales, y se promueve el **aprendizaje colaborativo** a través de la discusión y el debate.

En resumen, el curso busca proporcionar una comprensión profunda de la cinética química, desde sus fundamentos teóricos hasta sus aplicaciones experimentales más recientes, haciendo especial hincapié en el análisis de procesos en **escalas de tiempo ultracortas** (menores al picosegundo). La metodología incluye exposiciones, resolución de problemas en clase y trabajos prácticos de laboratorio.

Contenidos

UNIDAD 1. Superficie de energía potencial de reacción (SEP). Colisiones moleculares. Cinemática. Fuerzas y potenciales de interacción. Dinámica de los choques. Tipos de colisiones. Sección eficaz de dispersión. Dispersión elástica de esferas rígidas. Cálculo de trayectorias mediante la mecánica clásica. Teoría de colisiones. Interacciones entre moléculas reactivas. Colisiones entre moléculas reactivas. Sección eficaz reactiva. Deducción de la constante de velocidad de reacción.

UNIDAD 2. Teoría del complejo activado. Versión actual de la teoría del estado de transición. Interpretación termodinámica. Critica actual a la Teoría del estado de Transición.

UNIDAD 3. Teorías cinéticas para reacciones unimoleculares en fase gaseosa. Teoría de reacciones unimoleculares. Modelos RRK y RRKM para el cálculo de constantes de velocidad. Curvas de fall–off. Activación química.

UNIDAD 4. Reacciones en soluciones líquidas. Efecto jaula. Constante de velocidad controlada por difusión. Técnicas experimentales. Ejemplos de catálisis homogénea: catálisis enzimática. Reacciones de transferencia de carga.

UNIDAD 5. Teoria de Marcus del proceso de transferencia de electrones. Región Invertida. Diagramas de energía libre.

UNIDAD 6. Fotoquímica. Procesos fotofísicos. Eficiencia cuántica. Dinámica de la fotodisociación. Fluorescencia. Métodos experimentales. Química atmosférica.

UNIDAD 7. Femtoquímica. Ruptura y formación de enlaces en la escala de los femtosegundos y las scalas de longitud de los movimientos moleculares relacionados con los mismos. Concepto de paquete de ondas de materia. Análisis y discusión de los experimentos paradigmáticos de Ahmed Zewail que sugirieron la detección experimental del estado de transición.

Descripción de las actividades teóricas y practicas

La materia Cinética Química es una asignatura cuatrimestral con una carga de 8 horas semanales. Se divide en:

- Cinco horas de teoría-seminario-consulta: Estas clases se centran en la discusión de contenidos teóricos, análisis de ejemplos y resolución de problemas, fomentando la participación de los alumnos a través de preguntas y diálogos con los docentes, quienes actúan como facilitadores del aprendizaje. Se utilizan proyectores, computadoras y pizarrones, con una relación docente/alumno de aproximadamente 1/5.

- Tres horas de trabajos experimentales: Se realizan actividades prácticas en laboratorios de fisicoquímica, a veces utilizando instrumental específico del INIFTA. Los estudiantes trabajan con guías detalladas que incluyen información, descripciones de equipos y un formato para presentar resultados. Al finalizar, deben entregar un informe escrito con los resultados, cálculos y una discusión crítica. Un Jefe de Trabajos Prácticos supervisa estas actividades.

Las actividades experimentales se centran en dos áreas principales:

Estudio de reacciones químicas en solución: analizamos cómo diferentes factores afectan la constante de velocidad de reacción.

Procesos fotofísicos: Investigamos el espectro de absorción del estado excitado del $Ru(bpy)_3^{2+}$, su vida media del estado excitado y el efecto del oxígeno. También estudiamos el quenching de la luminiscencia del estado excitado del $Ru(bpy)_3^{2+}$ por sales de Fe(III) para determinar la constante bimolecular.

Todo el material de la asignatura (diapositivas, problemas, guías experimentales, enlaces a lecturas) está disponible en el aula virtual de la facultad.