

Cinética Química y Catálisis/ Química 2004

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES CUAUTITLAN

LICENCIATURA EN: QUÍMICA.

NOMBRE DE LA ASIGNATURA: CINÉTICA QUÍMICA Y CATÁLISIS.

ÓRGANO INTERNO QUE COORDINA EL PROGRAMA DE LA ASIGNATURA:

DEPARTAMENTO DE: CIENCIAS QUÍMICAS.

SECCIÓN DE: FISICOQUÍMICA.

CICLO AL QUE PERTENECE: TERMINAL.

REQUISITO DE SERIACIÓN: NINGUNO.

CARÁCTER DE LA ASIGNATURA: OPTATIVA.

TIPO DE ASIGNATURA: TEÓRICO.

MODALIDAD: CURSO.

SEMESTRE: 8°.

NÚMERO DE HORAS /SEMANA/ SEMESTRE:

TEORÍA:

3

PRÁCTICA:

N° DE CRÉDITOS:

6

CLAVE

0807

Cinética Química y Catálisis/ Química 2004

OBJETIVOS GENERALES DE LA ASIGNATURA.

Realizar una revisión de conceptos básicos de cinética química, relacionados con técnicas experimentales y de interpretación de resultados para la caracterización cinética de una reacción química, a través de la obtención de la correspondiente ecuación cinética y su mecanismo de reacción.

Estudiar los sistemas catalíticos mas importantes para la Ciencia y la Industria.

UNIDAD 1. GENERALIDADES DE CINÉTICA QUÍMICA.

Número de horas de teoría: 6.

OBJETIVO DE LA UNIDAD.

Fundamentar la relación entre el comportamiento cinético de una reacción y su mecanismo de reacción, analizando algunos parámetros cinéticos de interés.

1.1 Ecuaciones cinéticas y mecanismo de reacción.

1.2 Del mecanismo de reacción a la ecuación cinética.

1.3 De la ecuación cinética al mecanismo de reacción.

UNIDAD 2. CINÉTICA QUÍMICA AVANZADA.

Número de horas de teoría: 6.

OBJETIVOS DE LA UNIDAD.

Identificar las diferentes técnicas experimentales existentes, para estudiar la cinética de reacciones rápidas y detectar especies intermedias con tiempos de vida muy pequeños.

Evaluar la importancia actual de las técnicas Experimentales para reacciones rápidas.

Establecer los fundamentos y aplicaciones del estudio de la dinámica de las colisiones y la cinética no lineal.

2.1 Reacciones rápidas. Técnicas experimentales.

2.1.1 Métodos de flujo.

2.1.2 Métodos de pulso.

2.1.3 Otras técnicas.

2.2 Dinámica de las reacciones.

2.2.1 Técnica de haces moleculares cruzados.

2.2.2 Quimioluminiscencia.

2.3 Detección de estados de transición.

2.4 Teoría de las colisiones moleculares y dinámica.

2.5 Cinéticas no lineales.

UNIDAD 3. CATÁLISIS.

Número de horas de teoría: 3.

OBJETIVO DE LA UNIDAD.

Explicar propiedades y efectos catalíticos importantes en la eficiencia de un catalizador.

3.1 Catálisis y Catalizadores. Acción de un catalizador.

3.2 Propiedades de los catalizadores.

3.2.1 Actividad y Selectividad.

3.2.2 Efecto promotores y sinergia.

3.2.2 Soportes de catalizadores.

3.2.3 Venenos catalíticos.

UNIDAD 4: CATÁLISIS HOMOGÉNEA.

Número de horas de teoría:12.

OBJETIVO DE LA UNIDAD.

Identificar toda la variedad de mecanismos de acción de catalizadores existentes dentro de la catálisis Homogénea y sus principales aplicaciones.

4.1 Características generales de la catálisis homogénea.

4.1.1 Mecanismo general. Energía de activación.

4.1.2 Ecuación cinética y constantes de velocidad.

4.2 Catálisis ácido-base.

4.3 Catálisis organometálica.

4.4 Catálisis por micelas.

4.5 Catálisis por macromoléculas.

4.6 Catálisis por transferencia de fase.

UNIDAD 5: CATÁLISIS HETEROGÉNEA.

Número de horas de teoría:15.

OBJETIVOS DE LA UNIDAD.

Explicar los mecanismos de acción de los catalizadores en la Catálisis Heterogénea.

Destacar los sistemas catalíticos de mayor aplicación actual dentro de la catálisis heterogénea.

5.1 Características generales de la catálisis heterogénea.

5.1.1 Mecanismo general. Adsorción física y Adsorción química.

5.1.2 Efectos energéticos. Energía de activación y calor de adsorción.

5.1.3 Ecuación cinética y constantes de velocidad.

5.1.4 Reactividad y caracterización de sitios activos.

5.1.5 Adsorción disociativa. Caso O_2 y N_2

5.2 Catálisis sobre superficies.

5.2.1 Catálisis por metales y óxidos de metales.

5.2.1.1 Relación actividad catalítica- estructura electrónica.

5.2.1.2 Tendencias en la tabla periódica.

5.2.1.3 Adsorción del CO. Mecanismo σ/π de transferencia de carga.

5.2.1.4 La síntesis del amoníaco con fierro.

5.2.1.5 Estudio de otros casos prototipos.

5.2.2 Catalizadores bimetalicos.

5.2.2.1 Relación actividad catalítica- estructura electrónica.

5.2.2.2 Tendencias en la tabla periódica.

5.2.3 Catalizadores de metales y óxidos de metales soportados.

5.3 Catálisis en cavidades y canales.

5.3.1 Las zeolitas. composición e importancia.

5.3.2 Tipos de zeolitas. Estructura.

5.3.3 Las zeolitas como catalizadores.

5.3.3.1 Zeolitas con sitios ácidos.

5.3.3.2 Zeolitas con iones intercambiables.

Cinética Química y Catálisis/ Química 2004

UNIDAD 6. NUEVOS HORIZONTES EN LA CATÁLISIS.

Número de horas de teoría:6.

OBJETIVO DE LA UNIDAD.

Describir las tendencias mas importantes en las área de la ciencia y la tecnología, dirigidas hacia el uso de catalizadores.

6.1 Catalizadores en la Industria.

6.2 Materiales y catalizadores.

6.3 Diseño de catalizadores.

METODOLOGÍA DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE.

Mínima exposición del profesor, la cual debe ser de una o dos clases por tema y debatir el contenido a través de seminarios en donde se discutan artículos de revistas ó se analicen ejemplos de los libros. Se recomienda el uso de acetatos, diapositivas u otros medios audiovisuales en los que los mismos estudiantes puedan apoyarse para su exposición.

Esta técnica de enseñanza, requiere de la participación activa del estudiante y de sesiones de asesorías por parte del profesor y tiene la ventaja de desarrollar en el estudiante habilidades importantes para su futura acción profesional como son la exposición oral y la capacidad de sintetizar, analizar y generalizar, entre otras.

Uso de herramientas computacionales en modelación molecular.

PROPUESTA DE EVALUACIÓN.

Una evaluación escrita de conceptos generales, la participación en los Seminarios y entrega de trabajos escritos.

PERFIL PROFESIOGRÁFICO DEL DOCENTE.

Maestría en Físicoquímica, Doctorado en Ciencias Químicas con orientación Físicoquímica ó experiencia equivalente.

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

1. Houston, P.L. *Chemical kinetics and reaction dynamics*, McGraw Hill, New York, 2001.
2. Laidler, K.J. *Físicoquímica*, CECSA, México, 1997.
3. Levine, Ira N. *Físicoquímica*, Vol. 2, 4ª., Mc Graw Hill Interamericana, Madrid, 1996.
4. Massel, R.I. *Chemical kinetics & catalysis*, Wiley Interscience, New York, 2001.
5. Mortimer, M. et al. *Chemical kinetics and mechanism*, Royal Society of Chemical, London, 2002.

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

1. Dressler, R.A. *Chemical dynamics in extreme environments*, World Science. Publishers, USA, 2001.

Cinética Química y Catálisis/ Química 2004

2. Plonka, A. *Dispersive kinetics*, Kluwer Academic Press, Alemania, 2001.
3. Somorjai, Gabor A. *Introduction to surface chemistry and catalysis*, John Wiley and Sons, New York, 1994.
4. Van Santen y J.W. Niemantsverdriet. *Chemical kinetics and catalysis (Fundamental and applied catalysis)*, Plenum, USA, 1995.
5. Weitkamp, J. *Catalysis and zeolites: Fundamentals and applications*, Springer-Verlag, New York, 1999.