

Principios de Cinética Química con enfoque en Química Orgánica

Profesorado: Dr. Iván Zapata González

Centro de Investigación en Química Aplicada

Modalidad: on-line, teórico

Fechas: lunes, miércoles y jueves de agosto y septiembre, para cubrir 21 h totales

Cupo máximo: 30 asistentes

OBJETIVO GENERAL

Comprender los principios fundamentales de la cinética química, el análisis matemático de las velocidades de reacción y los mecanismos de reacción, así como su aplicación al estudio de procesos químicos complejos, incluyendo sistemas relevantes en química orgánica y de polímeros.

OBJETIVOS PARTICULARES

- Comprender de manera teórica-práctica los fundamentos básicos de cinética química.
- Analizar la cinética química de mecanismo de reacción complejos
- Dar herramientas computacionales para simplificar la estimación de constantes cinéticas y el análisis de diversos mecanismos de reacción.

REQUISITOS Y ANTECEDENTES REQUERIDOS PARA LOS PARTICIPANTES

Principios de Química Orgánica y grupos funcionales, Principios de programación, Matemática integral. Para facilitar la solución de problemas complejos (sistemas con reacciones paralelas y concurrentes) y el ajuste de modelos a datos experimentales, se le pide a los asistentes abrir una cuenta de Matlab online con un correo personal en <https://la.mathworks.com/products/matlab-online.html>

CONTENIDO TEMÁTICO

Describir el contenido por sesión

17 de agosto (3 h)	Bienvenida Módulo 1. Introducción a la cinética química (2 h) Temas • Definición de velocidad de reacción • Diferencia entre cinética química y termodinámica • Variables que afectan la velocidad ○ Concentración ○ Temperatura ○ Catalizadores ○ Solvente • Conceptos de: ○ Orden de reacción
-----------------------	--

	○ Ley de velocidad • Ejemplos clásicos de cinética en sistemas químicos
19 de agosto (3 h)	Módulo 2. Leyes de velocidad y ecuaciones integradas (3 h) Temas • Determinación experimental de leyes de velocidad • Métodos experimentales: ○ método de velocidades iniciales ○ método de aislamiento • Reacciones de: ○ orden cero ○ primer orden ○ segundo orden • Ecuaciones integradas • Tiempos de vida media • Interpretación gráfica de datos cinéticos
20 de agosto (2 h)	Módulo 3. Dependencia con la temperatura (3 h) Temas • Ecuación de Arrhenius • Energía de activación • Interpretación de parámetros cinéticos • Ecuación de Eyring • Ecuación de van't Hoff
24 de agosto (3 h)	Módulo 4. Mecanismos de reacción (3 h) Temas • Etapas elementales • Intermediarios y estado de transición • Aproximaciones cinéticas: ○ estado estacionario ○ pre-equilibrio • Determinación de mecanismos a partir de leyes de velocidad • Reacciones consecutivas** • Reacciones paralelas**
26 de agosto (3 h)	Módulo 5. Cinética de reacciones complejas (3 h) Temas • Reacciones reversibles • Reacciones autocatalíticas • Reacciones en cadena • Modelos matemáticos de sistemas complejos

27 de agosto (2 h)	Módulo 6. Métodos experimentales en cinética química (3 h) Temas - Técnicas de medición de velocidad - Espectroscopía UV-Vis - Conductimetría - Calorimetría - NMR cinético - Análisis computacional de datos cinéticos
31 de septiembre (3 h)	Módulo 7. Aplicaciones de cinética en química orgánica (3 h) Este bloque conecta la cinética con mecanismos orgánicos reales , útil para estudiantes de síntesis o química de materiales. Temas sugeridos 1. Cinética de sustitución nucleofílica - Mecanismos SN1 y SN2 - Evidencia cinética - Influencia de solvente y nucleófilo
2 de septiembre (2 h)	Modulo 7. Continuación 2. Cinética de eliminaciones - Mecanismos E1 y E2 - Competencia sustitución-eliminación 3. Cinética de reacciones radicalarias - Polimerización radicalaria - Etapas de iniciación, propagación y terminación - Estado cuasi-estacionario Clausura de curso

Dudas y comentarios escribir a: amgomexico@gmail.com

Contacto directo con el profesorado:
ivan.zapata@ciqa.edu.mx