



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
PROGRAMA DE POSGRADO EN CIENCIAS DE LA TIERRA
PROGRAMA DE ACTIVIDAD ACADÉMICA



Nombre de la Asignatura: **T.S. CIENCIAS AMBIENTALES: QUÍMICA DE SUPERFICIES DE NANOPARTÍCULAS Y COLOIDES AMBIENTALES**

Clave:	Semestre (s): Pares	Campo de Conocimiento: I Geofísica de la Tierra Sólida () II Exploración, Aguas Subterráneas, Modelación y Percepción Remota () III Geología () IV Ciencias Ambientales y Riesgos (X) V Ciencias Atmosféricas, Espaciales y Planetarias. ()	No. Créditos: 8
Carácter:	Horas		Horas por semana
Tipo: Teórico	Teoría:		4
Modalidad: Curso	Duración del programa: Semestral		
			Horas al semestre 64

Seriación: Sin seriación (X) Obligatoria () Indicativa ()

Actividad académica antecedente: Química Ambiental de suelos (recomendable)

Actividad académica subsecuente:

OBJETIVO GENERAL: Entender los aspectos teóricos más importantes sobre los procesos fisicoquímicos que ocurren en la interfaz sólido/solución acuosa enfocados a partículas naturales (coloides y nanopartículas), y su importancia en la disponibilidad de especies potencialmente tóxicas en el ambiente. En particular se comprenderá la composición, formas de medición, y estructuras de sistemas sorbente mineral/sorbato por métodos de química húmeda y fisicoquímica, espectroscópicos, y de modelación termodinámica.

Índice Temático

Unidad	Tema	Horas	
		Teóricas	Prácticas
1	Química de la interfaz mineral sólido – solución acuosa	20	
2	Espectroscopías aplicadas a la determinación de estructuras de complejos en la interfaz mineral sólido - solución acuosa	16	
3	Modelación y simulación de equilibrios de adsorción	16	
4	Temas Selectos de Nanopartículas Naturales	12	
5			
	Total de horas:	64	
	Suma total de horas:	64	

Contenido Temático

Unidad	Tema y Subtemas
--------	-----------------

1	<p>1. Química de la interfaz mineral sólido – solución acuosa</p> <p>1.1. Introducción, relevancia. Mecanismos de sorción en minerales. Adsorción-absorción-biosorción-precipitación superficial en minerales en espacio bidimensional concentración-tiempo.</p> <p>1.2. Tamaño de partícula de minerales y relación inversa con el área superficial específica. Minerales relevantes: arcillas y aluminosilicatos, óxidos metálicos (Fe, Al, Mn, Si, Ti), material húmico, carbonatos (Ca y Mg). Determinación experimental de área superficial específica.</p> <p>1.3. Tipo y densidad de sitios superficiales activos en minerales relevantes. Métodos de determinación de densidad de sitios superficiales activos.</p> <p>1.4. Determinación experimental de concentraciones sorbidas en minerales. Métodos directos e indirectos.</p> <p>1.5. Estructuras de minerales sorbentes. Aplicación de las Reglas de Pauling en estructuras internas y en átomos superficiales de estos minerales. Determinación de fuerzas de enlace. Determinación de valencias de enlace. Su aplicación tanto a la estructura interna como a la superficie de minerales. Tipos de grupos superficiales que predicen estos cálculos. Predicción de la estabilidad de complejos superficiales con base en estos cálculos.</p> <p>1.6. Tipos y fuentes de carga superficial: carga permanente por sustitución isomórfica en arcillas y aluminosilicatos; carga variable (con pH) por enlaces de oxígeno terminal insatisfechos en óxidos; carga variable (con pH) en grupos funcionales de material húmico.</p> <p>1.7. Influencia del pH y de la fuerza iónica en la carga superficial variable (protónica).</p> <p>1.8. Complejos superficiales de esfera interna y de esfera externa. Iones de capa difusa.</p> <p>1.9. Términos de las diferentes cargas en la interfaz, y ecuaciones de balance de carga en ésta.</p> <p>1.10. Definiciones de puntos de carga cero: Punto de carga cero neta protónica, Punto de carga cero neta, Punto de carga cero. Punto isoelectrico, Punto de intersección común, Puntos de cero efecto salino.</p> <p>1.11. Determinación experimental de las cargas permanentes y de las cargas variables en minerales. Capacidad de intercambio catiónico. Capacidad de intercambio aniónico.</p>
2	<p>2. Espectroscopías aplicadas a la determinación de estructuras de complejos en la interfaz mineral sólido - solución acuosa.</p> <p>2.1. Criterios necesarios para la aplicabilidad de métodos espectroscópicos superficiales a la interfaz mineral sólido-solución acuosa.</p> <p>2.2. Radiación de luz sincrotrón</p> <p>2.3. Absorción de Rayos X y su aplicación a la determinación de estructuras de complejos en la interfaz sólido-agua.</p> <p>2.4. Infrarrojo – de Transformada de Fourier: Reflectancia Total Atenuada (ATR-FTIR), y Reflectancia Difusa (DRIFT), y su aplicación en la determinación de estructuras de complejos en la interfaz sólido-agua.</p> <p>2.5. Otras técnicas de aplicación reciente</p>
3	<p>3. Modelación y simulación de equilibrios de adsorción</p> <p>3.1. Modelos empíricos (Kd, Freundlich, Langmuir) y su aplicación en la descripción de los mecanismos de formación de complejos en la interfaz mineral sólido-agua.</p> <p>3.2. Intercambio iónico en la descripción del comportamiento de sorción de arcillas en la zonas interlaminares.</p> <p>3.3. Modelo electrostático (Gouy-Chapman) y capa difusa en la descripción del comportamiento de adsorción en la interfaz mineral sólido-agua.</p> <p>3.4. Estequiometrias y reacciones químicas para describir la formación de complejos interfaciales.</p>

	<p>3.5. Modelos “termodinámicos”: Modelos interfaciales eléctricos y de complejación: de dos capas, de Stern, de capacitancia constante (CCM), de triple capa (TLM), de complejación multisitios con distribución de cargas (CD-MUSIC).</p> <p>3.6. Expresiones para expresar constantes de equilibrio de reacciones interfaciales.</p>
4	<p>4. Temas Selectos de Nanopartículas Naturales Lectura y presentación de artículos por los estudiantes: a) Generalidades, nanominerales, minerales nanoparticulados b) Óxidos metálicos, con enfoque específico en óxidos de Fe</p>

Bibliografía Básica:

1. Brown G.E., Jr, y Calas G. (2012) Mineral-Aqueous solution interfaces and their impact on the environment. European Association of Geochemistry. Geochemical Perspectives, Vol. 1, nos. 4 y 5. 742 pp.
2. Fenter P.A., Rivers M.L., Sturchio N.C., Sutton S.R. (eds.). (2002) Applications of synchrotron radiation in low-temperature geochemistry and environmental science. Geochemical Society, Mineralogical Society. Reviews in Mineralogy and Geochemistry Vol. 49. Washington D.C. 579 pp.
3. **Hochella M.F. Jr y White A.F. (Editors) (1990) Mineral-Water Interface Geochemistry. Reviews in Mineralogy, Vol. 23. Mineralogical Society of America. Washington, D.C., USA. 603 pp.**
4. **Sposito G. (2008) The Surface Chemistry of Natural Particles. Oxford Univ. Press, New York, USA. 344 pp.**
5. **Stumm W. (1992) Chemistry of the Solid-Water Interface. Wiley Interscience, New York, 478 pp.**

Bibliografía Complementaria:

1. Banfield J.F. y Navrotsky A. (eds.) (2001) Nanoparticles and the environment. Reviews in Mineralogy and Geochemistry Vol. 44. Washington D.C. 349 pp.
2. **Essington M.E. (2004) Soil and water chemistry. An integrative approach. CRC Press. Boca Raton, Florida. 534 pp.**
3. Huang P.M., Senesi N., Buffle J. (Editors) (1998) Structure and surface reactions of soil particles. J. Wiley, Chichester, Reino Unido, IUPAC series on analytical and physical chemistry of environmental systems ; v. 4. 492 pp.
4. **Langmuir D. (1997) Aqueous Environmental Geochemistry. Prentice Hall, Upper Saddle River, NJ, USA. 600 pp.**
5. Lasaga A.C. y Kirkpatrick R.J. (Editors) (1990) Kinetics of Geochemical Processes. Reviews in Mineralogy, Vol. 8. Mineralogical Society of America. Washington, D.C., USA. 398 pp.
6. Sparks D.L., Grundl T.J. (Editors) (1998) Mineral-water interfacial reactions : kinetics and mechanisms. American Chemical Society, Washington, D.C., USA, ACS symposium series 715, 438 pp.
7. Sposito G. (2008) The Chemistry of Soils. Oxford Univ. Press, New York, USA. 329 pp.
8. Stumm W. and Morgan J. (1996) Aquatic Chemistry. John Wiley and Sons. New York, USA 1024 pp.
9. Vaughan D.J. y Patrick R.A.D. (Editors) (1995) Mineral Surfaces. The Mineralogical Society Series 5. Chapman and Hall. London, UK. 370 pp.

Sugerencias didácticas:

- Exposición oral (X)
- Exposición audiovisual (X)
- Ejercicios dentro de clase (X)
- Ejercicios fuera del aula (X)
- Seminarios ()
- Lecturas obligatorias (X)
- Trabajo de Investigación ()

Mecanismos de evaluación de aprendizaje de los alumnos:

- Exámenes Parciales (X)
- Examen final escrito ()
- Trabajos y tareas fuera del aula (X)
- Exposición de seminarios por los alumnos ()
- Participación en clase (X)
- Asistencia ()
- Seminario ()
- Otras: Tareas, seminarios, reportes de prácticas, exámenes parciales, examen final. ()

Prácticas de taller o laboratorio ()

Prácticas de campo ()

Línea de investigación: Geoquímica Ambiental