

PROGRAMA DE FISICOQUÍMICA

Carrera: Ingeniería en Alimentos

Asignatura: Fisicoquímica

Núcleo al que pertenece: Inicial Obligatorio IV ¹

Docentes: Fernandez Alberti, Sebastián; Palma, Juliana Isabel; Noguera, Martín.

Prerrequisito obligatorio: Química II

Prerrequisito recomendado: Física II

Objetivos

Se espera que quienes cursen la asignatura:

- logren emplear las leyes de la Termodinámica y de la cinética química para explicar y predecir fenómenos de la naturaleza,
- reconozcan los alcances y limitaciones de una ley científica,
- desarrollen la capacidad de vincular la descripción matemática empleada en los principios de la fisicoquímica con otras formas de descripción de estos (visión microscópica, descripciones cualitativas basadas en la observación, etc.);
- desarrollen destrezas básicas del laboratorio químico, con énfasis en análisis y presentación de datos cuantitativos.

Contenidos mínimos

Termodinámica de las soluciones. Equilibrio de fases y químicos. Cinética química. Fenómenos de transporte. Propiedades coligativas. Estado coloidal. Electroquímica. Pilas y micropilas. Corrosión y fotoquímica. Adsorción física y química.

¹ En plan vigente, Res CS N° 454/15. Para el Plan Res CS N° 179/03 pertenece al Núcleo Básico Complementario.

Carga horaria: 6 horas semanales.

Programa analítico

Módulo I: Termodinámica Generalidades. Sistema, alrededores, universo. Separación de un sistema de sus alrededores: tipos de paredes. Estado de un sistema. Transformaciones entre estados: funciones de estado y funciones del camino. Primer principio. Energía interna, cambios de energía: calor y trabajo. Procesos. Entalpía. Propiedades extensivas e intensivas. Capacidad calorífica y calor específico. Ecuaciones de estado. Segundo principio. Entropía. Criterios de reversibilidad y espontaneidad de un proceso. Equilibrio. Interpretación microscópica de la entropía. Energía libre de Gibbs. El segundo principio aplicado a casos especiales: uso de la energía de Gibbs como criterio de espontaneidad. Tercer principio. Cálculo de entropías absolutas.

Módulo II: Equilibrio. Equilibrio químico. Energía libre de reacción. Energía libre estándar y constante de equilibrio. Potencial químico y actividad. Estados estándar. Relación entre actividad y concentración: coeficiente de actividad. Efecto de la temperatura sobre la energía libre y la constante de equilibrio. Pilas. Potencial de electrodo. Potencial de una pila. Relación entre el potencial de pilas y las propiedades termodinámicas de la reacción electroquímica involucrada. Equilibrios físicos. Regla de las fases. Sistemas de un componente: ecuación de Clausius Clapeyron. Soluciones: propiedades coligativas, ley de Raoult, ley de Henry y ley de Van't Hoff. Termodinámica de las propiedades coligativas. Sistemas de varias fases: equilibrio y transferencia de una sustancia entre dos fases. Cambios de energía libre asociados a la transferencia entre fases. Transferencia entre fases eléctricamente cargadas: potencial electroquímico.

Módulo III: Cinética Cinética química. Velocidad de reacción. Ley de velocidad y orden de reacción. Ley integrada de velocidad. Métodos de determinación del orden de reacción. Dependencia de la velocidad de reacción con la temperatura: ecuación de Arrhenius. Energía de activación de una reacción. Procesos elementales y mecanismos de reacción. Deducción de una ley de velocidad a partir del mecanismo: hipótesis de pre-equilibrio y del estado estacionario.

Reacciones unimoleculares. Relación entre equilibrio y cinética. Teoría de colisiones. Teoría del estado de transición. Cinética enzimática. Efecto isotópico cinético. Reacciones unimoleculares. Reacciones en cadena.

Trabajos prácticos experimentales

Trabajo Práctico 1: Calor de neutralización entre una base fuerte y un ácido fuerte

Objetivos: *Aplicar los conceptos de termoquímica para determinar el cambio de entalpía de una reacción química, con énfasis en el adecuado tratamiento de los datos experimentales.*

Descripción breve: *Se utilizan soluciones de HCl y NaOH previamente preparadas por los auxiliares de la asignatura, con concentraciones conocidas (determinadas por titulación) aproximadamente 1 M. Se mezclan en el calorímetro, y a partir de la diferencia de temperaturas registradas antes y luego del mezclado, se calcula la entalpía de reacción. Para eso, previamente es necesario determinar la constante del calorímetro y los calores de dilución de los reactivos. Para el primer caso, se realiza una experiencia independiente donde se mezclan en el mismo calorímetro cantidades iguales de agua fría y caliente, midiendo cuidadosamente las temperaturas antes y luego del mezclado. Para los calores de dilución, se realiza la mezcla en el calorímetro de cantidades iguales de agua y de solución de ácido o de base, registrando las temperaturas. En todos los casos, las temperaturas se registran durante un intervalo suficiente para realizar una recta de regresión que permita corregir las pérdidas de calor, ya que el dispositivo empleado no es estrictamente adiabático.*

Trabajo Práctico 2: Equilibrio de formación de un complejo

Objetivos: *Aplicar los conceptos de equilibrio químico y espectroscopia UV-Visible para determinar la constante de equilibrio de una reacción de complejación y el cambio de energía libre asociado, con énfasis en el adecuado tratamiento de los datos experimentales.*

Descripción breve: *Se utilizan soluciones de HCl diluido y de ácido salicílico previamente preparadas por los auxiliares de la asignatura y de concentración conocida. Los estudiantes preparan una solución de ión férrico de concentración idéntica a la de ácido salicílico, usando HCl para mantener el hierro soluble.*

Usando el método de Job, se preparan mezclas con distintas proporciones de salicílico y de férrico, y se determina la fórmula mínima del complejo, midiendo la concentración de este mediante medidas en el UV visible, a una longitud de onda escogida previamente por los alumnos por examen del espectro adquirido para el complejo. Se realiza una curva de calibración para convertir las absorbancias del complejo en concentraciones. Las concentraciones del complejo, junto con las de los reactivos que quedan libres en el equilibrio, se usan para calcular la constante de equilibrio en función de las concentraciones (K_C), y de allí la energía libre de Gibbs.

Trabajo Práctico 3: Cinética de hidrólisis de acetato de metilo

Objetivos: *Determinar la constante de reacción y la energía de activación de la reacción de hidrólisis, con énfasis en el adecuado tratamiento de los datos experimentales. Discutir aspectos de la selección de modelos en cinética química, mecanismos y aproximaciones.*

Descripción breve: *Se utilizan soluciones de HCl y NaOH previamente preparadas por los auxiliares de la asignatura, con concentraciones conocidas (determinadas por titulación) aproximadamente 1 M y 0.2 M, respectivamente. Se realiza la reacción química en un baño termostático, mezclando el acetato de metilo con el HCl, previamente equilibrados a temperatura, registrando cuidadosamente el tiempo. Se toman muestras de la reacción a distintos tiempos, y se determina la concentración de ácido acético producido, por titulación con NaOH patrón. De la concentración de ácido acético producido, se obtiene la concentración de acetato de metilo remanente a cada tiempo, que se grafica en función del tiempo para obtener la constante cinética por regresión (la reacción se describe bien como de pseudo-primer orden en las condiciones ensayadas). Se repite la experiencia a 1 o 2 temperaturas adicionales, y se usan las constantes cinéticas obtenidas para realizar un gráfico de Arrhenius, del que se obtiene la energía de activación.*

Bibliografía

- Fisicoquímica. G. Castellan. 2º Edición. Addison Wesley Iberoamericana, 1987.

- Physical Chemistry. Principles and Applications in Biological Sciences. Tinoco, Third Edition. PrenticeHall, 1996.
- Fisicoquímica. P. Atkins. Todas las ediciones son apropiadas.
- Physical Chemistry. I. Levine. Fourth edition. McGraw-Hill Inc, 1994.
- Fisicoquímica. Keith Laidler. 1° Edición. Compañía Editorial Continental, 1997.
- Physical Chemistry. 2nd edition. R. Alberty. John Wiley and Sons, 1996.

La bibliografía que no se encuentra en la Biblioteca de la UNQ es suministrada por los docentes, ya sea porque se dispone de las versiones electrónicas y/o se dispone del ejemplar en el grupo de investigación asociado.

Organización de las clases

Clases teóricas cubriendo todos los contenidos mencionados en el Programa Analítico. Clases de resolución de problemas ("seminarios"). Un trabajo práctico de laboratorio para cada módulo, como se describe en el Programa Analítico.

Modalidad de evaluación

Modalidad regular

Se realizarán 2 exámenes parciales, pudiéndose recuperar cada uno de ellos una sola vez. El primer parcial abarca íntegramente el módulo de Termodinámica y los temas de Equilibrio físico, correspondientes al módulo de Equilibrio. El segundo parcial abarca los temas restantes del módulo de Equilibrio y los del módulo Cinética. Los parciales se aprueban con 4 (cuatro) puntos sobre 10. Para aprobar la cursada, además de aprobar cada uno de los parciales, es necesario aprobar un examen integrador que se tomará al final de la cursada. Se deberá entregar un informe de cada trabajo práctico, siguiendo los lineamientos dados por el/la instructor/a, y que deberá entregarse en un plazo no superior a los diez días desde la realización de la experiencia. Para aprobar los laboratorios es necesario: haber asistido a todos ellos, aprobar los informes correspondientes y haber aprobado todos los parcialitos. La no-aprobación de los informes de laboratorio o la entrega fuera de término hará que el/la alumno/a pase como

“pendiente de aprobación” (siempre y cuando haya aprobado las evaluaciones correspondientes).

Para aprobar el curso de Fisicoquímica es necesario: (i) Haber asistido a los tres trabajos prácticos de laboratorio y haber aprobado los informes correspondientes. (ii) Haber aprobado los tres exámenes parciales, en cualquiera de sus instancias. (iii) Haber aprobado el examen final integrador (según lo indicado en el párrafo precedente).

Aprobación de la asignatura según Régimen de Estudios vigente de la Universidad Nacional de Quilmes:

La aprobación de la materia bajo el régimen de regularidad requerirá: Una asistencia no inferior al 75 % en las clases presenciales previstas, y cumplir con al menos una de las siguientes posibilidades:

- (a) la obtención de un promedio mínimo de 7 puntos en las instancias parciales de evaluación y de un mínimo de 6 puntos en cada una de ellas.
- (b) la obtención de un mínimo de 4 puntos en cada instancia parcial de evaluación y en el examen integrador, el que será obligatorio en estos casos. Este examen se tomará dentro de los plazos del curso.

Los/as alumnos/as que obtuvieron un mínimo de 4 puntos en cada una de las instancias parciales de evaluación y no hubieran aprobado el examen integrador mencionado en el Inc. b), deberán rendir un examen integrador o, en su reemplazo, la estrategia de evaluación integradora final que el programa del curso establezca, en las fechas que la Universidad destine para tal fin.

Modalidad libre

En la modalidad de libre, se evaluarán los contenidos de la asignatura con un examen escrito, un examen oral e instancias de evaluación similares a las realizadas en la modalidad presencial. Los contenidos a evaluar serán los especificados anteriormente incluyendo demostraciones teóricas y problemas de aplicación.

CRONOGRAMA TENTATIVO

Semana	Tema/unidad	Actividad*				Evaluación
		Teórico	Práctico			
			Res Prob .	Lab.	Otros Especifica r	
1	Módulo 1: Termodinámica	X				
2	Módulo 1: Termodinámica	X	X			
3	Módulo 1: Termodinámica	X	X			
4	Módulo 1: Termodinámica		X			
5	Módulo 1: Termodinámica		X			
6	Módulo 1: Termodinámica			X		
7	Módulo 2: Equilibrio	X	X			
8	Módulo 2: Equilibrio		X			X
9	Módulo 2: Equilibrio	X				X (recup.)
10	Módulo 2: Equilibrio	X	X			
11	Módulo 2: Equilibrio		X			
12	Módulo 2: Equilibrio		X	X		
13	Módulo 3: Cinética	X	X			
14	Módulo 3: Cinética	X	X			
15	Módulo 3: Cinética	X	X			
16	Módulo 3: Cinética			X		X

17	Módulo 3: Cinética					X (recup.)
18	Integrador					X