



Ministerio de Cultura y Educación
Universidad Nacional de San Luis
Facultad de Química Bioquímica y Farmacia
Departamento: Química
Área: Química Física

(Programa del año 2012)

I - Oferta Académica

| Materia | Carrera | Plan | Año | Período |
|----------------|---------------|------|------|-----------------|
| QUIMICA FISICA | ANAL. QUIMICO | 7/04 | 2012 | 1° cuatrimestre |

II - Equipo Docente

| Docente | Función | Cargo | Dedicación |
|------------------------------|-------------------------|------------|------------|
| PAPPANO, NORA BEATRIZ | Prof. Responsable | P.Asoc Exc | 40 Hs |
| DEBATTISTA, NORA BEATRIZ | Prof. Colaborador | SEC U EX | 2 Hs |
| MASUELLI, MARTIN ALBERTO | Responsable de Práctico | JTP Exc | 40 Hs |
| NIETO VAZQUEZ, RODOLFO RUBEN | Responsable de Práctico | JTP TC | 30 Hs |
| FERRARI, GABRIELA VERONICA | Auxiliar de Práctico | JTP Semi | 20 Hs |

III - Características del Curso

| Credito Horario Semanal | | | | |
|-------------------------|----------|-------------------|---------------------------------------|-------|
| Teórico/Práctico | Teóricas | Prácticas de Aula | Práct. de lab/ camp/ Resid/ PIP, etc. | Total |
| 8 Hs | Hs | Hs | 3 Hs | 11 Hs |

| Tipificación | Periodo |
|--|-----------------|
| B - Teoría con prácticas de aula y laboratorio | 1° Cuatrimestre |

| Duración | | | |
|------------|------------|---------------------|-------------------|
| Desde | Hasta | Cantidad de Semanas | Cantidad de Horas |
| 14/03/2012 | 22/06/2012 | 15 | 160 |

IV - Fundamentación

La enseñanza de las unidades temáticas teóricas y experimentales que conforman el presente programa, contribuye a la formación básica del estudiante en Termodinámica, Electroquímica y Cinética de Reacción.

El propósito de la Termodinámica es investigar las relaciones entre las diversas clases de energía y sus diversas manifestaciones. Las leyes de la Termodinámica rigen la transformación de un tipo de energía a otro.

Por otro lado, la presencia de iones en las soluciones influyen en el comportamiento de los sistemas. Teniendo en cuenta que estos pueden ser ácidos, bases o sales, es necesario un balance preciso de la concentración de protones.

Asimismo, el estudio de las reacciones electroquímicas es de gran importancia porque convierten energía química en energía eléctrica. El cambio de energía libre para una reacción electroquímica puede ser medido desde el trabajo eléctrico que realiza y tiene aplicaciones relevantes tanto en sistemas químicos como biológicos.

La velocidad de las reacciones químicas constituye el campo de estudio de la Cinética Química. Mediante el análisis de la influencia de distintos factores tales como la temperatura, presión, concentración de reactantes y presencia de catalizadores, se puede aprender mucho sobre las etapas por las que los reaccionantes se transforman en productos.

Los temas desarrollados dan la apoyatura necesaria para el mejor aprovechamiento de otras materias profesionales de la Carrera. Asimismo, los prepara para la resolución de problemas específicos de los Analistas Químicos, como determinaciones cuantitativas de propiedades fisicoquímicas de diferentes compuestos químicos.

V - Objetivos / Resultados de Aprendizaje

El objetivo del Curso es dar una visión general de las ramas de la Química-Física que conforman la denominada Química Física Macroscópica: las transformaciones de la energía, la termodinámica de las transiciones de fases, el comportamiento y las reacciones de los iones en diversos ambientes, la determinación de las velocidades de reacción y su dependencia con distintas variables que la afectan.

El alumno debe adquirir destreza en:

- manejar el material habitual en un Laboratorio de Química-Física
- realizar experiencias
- analizar los resultados
- obtener conclusiones lógicas en base a los conceptos ya adquiridos que le permitan la elaboración de un correcto informe.

Necesariamente, para lograr estos objetivos debe dominar no sólo los conceptos por separado sino lograr la interrelación de los mismos.

VI - Contenidos

TEMA 1: Termodinámica

Introducción. Sistemas termodinámicos. Estado y funciones de estado. Estados de equilibrio. Temperatura. Primera ley de la Termodinámica: calor y trabajo; principio de equivalencia. Energía interna. Aplicaciones de la Primera ley. Entalpía: trabajo útil y calor; cambios de estados de agregación; termoquímica: calor de reacción y Ley de Hess; calor de combustión; calor de formación; transformaciones endotérmicas y exotérmicas. Capacidades caloríficas. Segunda ley de la Termodinámica. Entropía: tercera ley; evaluación de entropías absolutas.

TEMA 2: Energía libre

Energía libre. Reacciones espontáneas. Estados termodinámicos estándar y funciones estándar. Cambio de energía libre bajo condiciones estándar. Métodos para la determinación del cambio de energía libre estándar de una reacción. Energía libre y constante de equilibrio. La pila electroquímica. Cambio de la energía libre de Gibbs y su relación con el pH. Dependencia de la energía libre estándar con respecto a la temperatura. Ecuación de Gibbs-Helmholtz. Cambio de energía libre bajo condiciones no estándar.

TEMA 3: Equilibrio químico

Naturaleza del equilibrio químico. Relación entre la constante de equilibrio y el cambio de energía libre. Actividades y coeficientes de actividad. Dependencia de la constante de equilibrio con la temperatura y ecuación de Van t'Hoff. Equilibrio de reacciones en las que intervienen protones en medios tamponados. Acoplamiento de reacciones. Equilibrio de fases y regla de las fases. Sistemas de un componente. Ecuación de Clapeyron. Equilibrios líquido-vapor y sólido-vapor. Equilibrio sólido-líquido

TEMA 4: Propiedades coligativas

Propiedades coligativas. Disminución de la presión de vapor. Influencia de la temperatura y de los solutos. Ley de Raoult. Descenso del punto de congelación y constante del descenso crioscópico. molal. Aumento del punto de ebullición y constante del aumento ebulloscópico. Aplicaciones. Osmosis. Presión osmótica y ecuación de Van t'Hoff. Pesos moleculares de polímeros. Disoluciones acuosas de electrolitos fuertes y débiles y el factor "i" de Van t'Hoff. Aplicaciones: cálculo del coeficiente de ionización y determinación de constantes de ionización. Tonicidad.

TEMA 5: Soluciones y solubilidad

Soluciones y solubilidad. Soluciones de sólidos en líquidos. Velocidad de solución. Efecto de la temperatura. Efecto de las sales: salting-in y salting-out. Solubilidad de solutos que contienen dos o más especies. Solubilidad de sales: producto de solubilidad termodinámico y aparente; coeficiente de actividad iónica medio; ley de Debye-Hückel. Efecto de electrolito. Efecto de ión común. Determinación de la solubilidad. Soluciones de líquidos en líquidos: sistemas binarios y ternarios. Soluciones de gases en líquidos: ley de Henry; coeficientes de solubilidad y absorción.

TEMA 6: Ácidos y Bases

Ácidos y Bases. Clasificación de Brønsted. Fuerza de ácidos y bases. Disociación del agua. Constante de disociación de ácidos e hidróxidos. Concepto de pH. Neutralización. Curvas de titulación: ácido fuerte – base fuerte y ácido débil – base fuerte. Soluciones reguladoras de pH. Ecuación de Henderson-Hasselbach. Poder amortiguador. Polielectrolitos. pH isoiónico e isoeléctrico. Disociación de ácidos polipróticos débiles. Indicadores de pH. El pH de disoluciones salinas. Importancia del

pH. Ionización pH-dependiente de los aminoácidos.

TEMA 7: Electroquímica

Conductancia eléctrica de las disoluciones: conductancia; conductancia específica. Conductancia equivalente. Teoría de Arrhenius para la disociación iónica. Equilibrio de disociación. Número de transporte. Fuerza electromotriz de las pilas químicas y termodinámica de los electrolitos. Tipos de electrodos. Pilas electroquímicas, fuerzas electromotrices y reacciones de las pilas. Variaciones de energía libre de las reacciones de las pilas. Fem de referencia y potenciales de electrodos. Dependencia de la fem de una pila con la actividad y concentración de los reactivos: ecuación de Nernst. Determinación de actividades por medidas de fem. Determinación de propiedades termodinámicas mediante medidas de fem.

TEMA 8: Cinética

Cinética Química. Velocidad de reacción. Orden de reacción. Constante de velocidad. Método de integración. Cinéticas de cero, primer y segundo orden. Período de vida media. Reacciones simultáneas, consecutivas y reversibles. Influencia de la temperatura sobre la velocidad de reacción: ley de Arrhenius. Catálisis ácido-base. Influencia de la fuerza iónica y del disolvente sobre la velocidad de reacción.

TEMA 9: Catálisis enzimática. Cinética de crecimiento de microorganismos. Inhibiciones.

Catálisis enzimática. Mecanismo de Michaelis y Mentem. Determinación experimental de los valores de K_M y $V_{máx}$. Inhibiciones. Efecto de la temperatura y pH. Velocidad de crecimiento de microorganismos. Velocidad de crecimiento específica. Inhibición del crecimiento de microorganismo por agentes bacteriostáticos.

VII - Plan de Trabajos Prácticos

I. TRABAJOS PRACTICOS DE LABORATORIO

1. a. NORMAS DE SEGURIDAD EN EL LABORATORIO.

Objetivos: Normas básicas de seguridad. Elementos de seguridad. Equipos de protección personal. Higiene y condiciones generales de trabajo. Manipulación de material de vidrio y productos químicos. Prevención de incendios. Realización de experimentos. Disposición y eliminación de residuos. Mantenimiento del laboratorio. Acciones a seguir en caso de emergencia: fuego en laboratorio; quemaduras; cortes; derrames de productos químicos sobre la piel; contacto de productos químicos en los ojos; inhalación de productos químicos; actuación en caso de ingestión de productos químicos.

1.b. USO DEL MATERIAL DE LABORATORIO

Objetivos: Manipulación y uso específico de material de vidrio; manejo de reactivos diversos; manipulación de instrumental. Preparación y titulación de soluciones.

2. DETERMINACION DE LA SOLUBILIDAD DE UNA SAL POCO SOLUBLE.

Objetivos: Determinación del producto de solubilidad termodinámico y aparente del carbonato de calcio, mediante volumetría ácido-base y análisis de la influencia de la fuerza iónica sobre la solubilidad de la sal.

3. VALORACION CONDUCTIMETRICA DE SISTEMAS ACIDO-BASE

Objetivos: Estudio de la variación de concentración de iones hidrógeno, mediante conductimetría, en la valoración de un ácido fuerte, un ácido débil y una mezcla de ambos. Determinación de los puntos de equivalencia de cada sustancia y el pKa para el ácido débil.

4. DETERMINACIÓN DEL COEFICIENTE DE PARTICIÓN OCTANOL / AGUA DE UN COMPUESTO DE INTERÉS BIOLÓGICO.

Objetivos: Determinación, mediante espectroscopía UV-vis, de la constante práctica de reparto de un compuesto de aplicación farmacéutica (p.e. maleato de clorfeniramina) en el sistema octanol-agua.

5. DETERMINACION ESPECTROFOTOMETRICA DEL pKa DEL INDICADOR ANARANJADO DE METILO.

Objetivos: Determinación de la constante de disociación ácida del indicador anaranjado de metilo, empleando un método espectrofotométrico.

6. ELECTROQUIMICA: CONDUCTIVIDAD

Objetivos: Comprobación de la validez de las leyes de Ostwald y de Kohlrausch para soluciones electrolíticas. Determinación de la constante de disociación del ácido acético y de la conductividad equivalente de KCl.

7. ESTUDIO CINETICO DE UNA REACCION DE PSEUDO-PRIMER ORDEN

Objetivos: Determinación del orden y constante de velocidad de la reacción, aplicando método integral y tiempo de vida media, por medio de una técnica espectrofotométrica. Análisis de la influencia de la concentración de reactivo sobre la velocidad de reacción y la constante de velocidad.

II. TRABAJOS PRACTICOS DE AULA.

Resolución de problemas de aplicación sobre los siguientes temas de la Asignatura: Termodinámica. Calor y trabajo. Energía Interna. Entalpía. Termoquímica. Capacidades caloríficas. Entropía. Energía libre. Energía libre y constante de equilibrio. Cambio de la energía libre de Gibbs y su relación con el pH. Dependencia de la energía libre estándar con la temperatura. Relación entre la constante de equilibrio y el cambio de energía libre. Dependencia de la constante de equilibrio con la temperatura. Equilibrio de fases. Disminución de la presión de vapor. Descenso del punto de congelación. Aumento del punto de ebullición. Presión osmótica. Determinación de pesos moleculares. Cálculo del coeficiente de ionización, el factor i de Van't Hoff, determinación de constantes de ionización. Producto de solubilidad termodinámico y aparente. Coeficiente de actividad iónica medio. Soluciones de gases en líquidos. Ácidos y bases. Constantes de disociación. Soluciones reguladoras de pH. Conductancia eléctrica de las disoluciones. Pilas electroquímicas. Aplicaciones de medidas de fem. Cinética química básica. Velocidad y orden de reacción. Constante de velocidad. Influencia de la temperatura sobre la velocidad de reacción. Catálisis ácido-base. Catálisis enzimática. Cinética química aplicada.

NORMAS BÁSICAS DE SEGURIDAD

1. Antes de empezar el trabajo en el laboratorio familiarizarse con los elementos de seguridad disponibles y seguir, rigurosamente, las indicaciones del profesor a cargo de la realización del trabajo práctico.
2. Utilizar antiparras de seguridad para evitar salpicaduras.
3. Se debe usar guardapolvo en el laboratorio. No llevar ropa corta.
4. Es recomendable utilizar guantes, sobretodo cuando se utilizan sustancias corrosivas o tóxicas.
5. Evitar que las mangas, puños o pulseras estén cerca de las llamas o de la máquina eléctrica en funcionamiento.
6. No comer ni beber en el laboratorio
7. Lavarse las manos después de cada experimento y antes de salir del laboratorio.
8. No fumar en el laboratorio por razones higiénicas y de seguridad.
9. Cerrar herméticamente los frascos de productos químicos después de utilizarlos.
10. El área de trabajo tiene que mantenerse siempre limpia y ordenada, sin libros, abrigos, bolsas, productos químicos vertidos, exceso de frascos de productos químicos, equipos innecesarios y cosas inútiles.

VIII - Regimen de Aprobación

SOBRE LOS TRABAJOS PRACTICOS

1. Los Trabajos Prácticos de Química Física deberán cumplirse en los días y hora que establezca la Cátedra.
2. Toda comunicación o citación se hará por medio del avisador de la Cátedra.
3. Cada alumno deberá cumplir semanalmente tres horas de Trabajo Práctico de Laboratorio y diez horas (o en su defecto siete) de clases Teórico-Prácticas obligatorias.
4. Se establecerán horarios de consulta en los días que convenga a la mayoría de los alumnos.
5. Antes de la realización de un Práctico de Laboratorio, el Alumno deberá responder un cuestionario escrito sobre el tema de trabajo. El alumno podrá ser interrogado durante el desarrollo de cualquier trabajo práctico.
6. El alumno deberá concurrir a los Trabajos Prácticos munidos de los elementos necesarios: cuaderno, calculadora, papel milimetrado, elementos de geometría, guardapolvo, repasador, etc.
7. En ningún caso una Comisión de Alumnos iniciará un Trabajo experimental eléctrico, óptico, etc., sin que previamente, el Personal Docente haya dado la autorización correspondiente. Caso contrario, cualquier daño al instrumental utilizado será responsabilidad de la Comisión, que estará obligada a costear su reparación.
8. Un Trabajo Práctico de Laboratorio se dará por aprobado si el Alumno cumple con los siguientes requisitos:
 - a) Rinde satisfactoriamente el cuestionario previo.
 - b) Realiza la parte experimental correctamente.

c) Presenta un informe ordenado con una breve introducción teórica, que incluya las ecuaciones fundamentales, las operaciones que realizó, cuadro de valores, cálculos, gráficas, errores y conclusiones.

9. Para tener derecho a la recuperación de Trabajos Prácticos de Laboratorio, el Alumno deberá aprobar de primera instancia el 80 % del total.

10. Para regularizar la Asignatura los Alumnos deberán asistir al 80% de las clases Teórico-Prácticas y aprobar el 100 % del Plan de Trabajos Prácticos de Laboratorio.

SOBRE LOS PARCIALES

1. Durante el Período Lectivo se tomarán tres exámenes parciales escritos, sobre los Trabajos Prácticos realizados (de Aula y Laboratorio), cuyas fechas se darán a conocer con 10 (diez) días de anticipación. Podrán rendir cada examen parcial aquellos Alumnos que hayan realizado el 100% de los Trabajos Prácticos de Aula y de Laboratorio, correspondientes a dicho parcial. Puntaje para la aprobación: siete (7) puntos.

2. La Cátedra ofrecerá al Alumno tres recuperaciones de exámenes parciales.

PROMOCION SIN EXAMEN FINAL

1. La Cátedra brindará la posibilidad de Promoción sin Examen, a todos los Alumnos que hayan cumplimentado las correlatividades correspondientes, para lo cual deberán rendir tres evaluaciones escritas sobre temas teóricos.

2. Dispondrán de una única recuperación o sea que sólo pueden desaprobar un parcial de promoción.

3. Puntaje para la aprobación: siete (7) puntos.

IX - Bibliografía Básica

[1] BIBLIOGRAFIA DEL PROGRAMA ANALITICO Y DE EXAMEN

[2] - Levine, I.A., "Fisicoquímica", 4ª Edición, Volumen I y II, Ed. Mc Graw Hill, 1996.

[3] - Morris, J.G., "Fisicoquímica para Biólogos", Ed. Reverté, 1982.

[4] - Gennaro, A.R., "Remington: Farmacia", 19ª Edición, Ed. Médica Panamericana, 1995.

[5] - Barrow, G.M., Química Física, Ed. Reverté, 1976.

[6] - Laidler, K.J., "Chemical Kinetics", 3ª Ed., Harper y Row, 1987.

[7] - Castellan, G.W., "Fisicoquímica", Addison Wesley Logman, México, 1998

[8] BIBLIOGRAFIA DE TRABAJOS PRACTICOS

[9] - Levine, I.A., "Fisicoquímica", 4ª Edición, Volumen I y II, Ed. Mc Graw Hill, 1996.

[10] - Morris, J.G., "Fisicoquímica para Biólogos", Ed. Reverté, 1982.

[11] - Wentworth, W.E. y Ladner, S.J., "Fundamentos de Química Física", Ed. Reverté, 1975.

[12] - Metz, C.R., "Fisicoquímica", Mc Graw-Hill, 1977.

[13] - Chang, R., "Physical Chemistry with Applications to Biological Systems", Collier Mac Millan International Editions, 1977.

[14] - Atkins, P.W., "Physical Chemistry", 5ª Ed., Oxford University Press, 1995.

X - Bibliografía Complementaria

[1] - Atkins, P; de Paula J.: "Química Física", Ed. Panamericana, 2008.

[2] - Chang, R., "Physical Chemistry with Applications to Biological Systems", Collier Mac Millan International Editions, 1977.

[3] - Frumento, A.S., "Biofísica", 3ª Edición, Ed. Mosby/Doyma Libros, 1995.

[4] - Laidler, K.J., "Cinética de Reacciones", Vol. I y II. Ed. Alhambra, 1979.

XI - Resumen de Objetivos

El objetivo del Curso es dar una visión general de las ramas de la Química-Física que conforman la denominada Química Física Macroscópica: las transformaciones de la energía, la termodinámica de las transiciones de fases, el comportamiento y las reacciones de los iones en diversos ambientes, la determinación de las velocidades de reacción y su dependencia con distintas variables que la afectan.

El alumno debe adquirir destreza en:

- manejar el material habitual en un Laboratorio de Química-Física
- realizar experiencias
- analizar los resultados

- obtener conclusiones lógicas en base a los conceptos ya adquiridos que le permitan la elaboración de un correcto informe.
Necesariamente, para lograr estos objetivos debe dominar no sólo los conceptos por separado sino lograr la interrelación de los mismos.

XII - Resumen del Programa

TEMA 1: Leyes de la termodinámica. Estado y funciones de estado. Calor y trabajo.

TEMA 2: Energía libre. Reacciones espontáneas. Cambio de las funciones termodinámicas. Energía libre y constante de equilibrio. Ecuación de Gibbs-Helmholtz.

TEMA 3: Equilibrio químico. Ecuación de Van t'Hoff. Equilibrio de fases. Ecuación de Clapeyron.

TEMA 4: Propiedades coligativas. Disminución de la presión de vapor. Ley de Raoult. Descenso del punto de congelación. Aumento del punto de ebullición. Osmosis Ecuación de Van t'Hoff. Aplicaciones.

TEMA 5: Solubilidad. Soluciones de sólidos en líquidos. Producto de solubilidad termodinámico y aparente. Coeficiente de actividad iónica medio. Ley de Debye-Hückel. Soluciones de gases en líquidos. Ley de Henry.

TEMA 6: Ácidos y bases. Clasificación de Brønsted. Concepto de pH. Soluciones reguladoras de pH. Poder amortiguador. Ecuación de Henderson - Haselbach.

TEMA 7: Conducción electroquímica. Número de transporte. Pilas electroquímicas. Ecuación de Nernst.

TEMA 8: Cinética química básica. Ley de Arrhenius. Catálisis ácido-base.

TEMA 9: Enzimas. Mecanismo de Michaelis - Mentem. Inhibiciones. Velocidad de crecimiento de microorganismos. Inhibición por agentes bacteriostáticos.

XIII - Imprevistos

XIV - Otros