

FISICOQUIMICA APLICADA

Se presentan conceptos fundamentales de fisicoquímica y se los relaciona con técnicas experimentales, materiales tradicionales como así también bio- y nano-estructurados y sus aplicaciones en investigación y tecnología. Esta materia apunta a expandir las capacidades de los egresados de física para encarar proyectos interdisciplinarios de investigación o desarrollo industrial.

Clase 1: Repaso de Termodinámica

Estados y leyes de los gases. Importancia climatología: las leyes de los gases y el clima. Gases reales: interacciones moleculares, ecuación de van der Waals, principio de estados correspondientes.

Primera ley. Trabajo, calor y energía. Energía interna. Entalpía. Importancia en bioquímica y ciencia de materiales: calorimetría diferencial de barrido. Cambios adiabáticos. Termoquímica.

Funciones de estado y diferenciales exactos. Cambios de energía interna. Dirección de cambio espontáneo. Entropía. Importancia en ingeniería: refrigeración.

Cambios de entropía en procesos específicos. Tercera ley. Energías de Helmholtz y Gibbs. Energías de Gibbs estándar. Combinación de primera y segunda ley.

Clase 2: Transformaciones físicas de substancias.

Diagramas de fase. Estabilidad de las fases. Impacto tecnológico: fluidos supercríticos. Ejemplos de diagramas de fase típicos. Equilibrio termodinámico. La clasificación de Ehrenfest.

Mezclas simples. Descripción termodinámica. El potencial químico de líquidos. Propiedades de las soluciones. Mezclas líquidas. Actividades del solvente y del soluto. Actividades de soluciones regulares. Actividades de iones en solución.

Importancia biológica: ósmosis en fisiología y bioquímica.
Importancia biológica: solubilidad de gases y respiración.

La regla de las fases. Sistemas de dos componentes. Diagramas de presión de vapor. Diagramas de temperatura vs. composición. Diagramas de fase líquido-líquido. Diagramas de fase líquido-sólido. Importancia en ciencia de materiales: cristales líquidos.

Importancia en ciencia de materiales: ultrapureza e impureza controlada.

Clase 3: Equilibrio químico

Descripción del equilibrio. Mínimo de energía de Gibbs. Reacciones químicas espontáneas. Dependencia con la presión y la temperatura.
Importancia en ingeniería: extracción de metales a partir de sus óxidos.

Equilibrio electroquímico. Electrodos y medias reacciones. Celdas electroquímicas y la fuerza electromotriz. Potenciales estándar.
Importancia en bioquímica: conversión de energía en células biológicas.
Importancia tecnológica: celdas fotovoltaicas.
Importancia tecnológica: baterías de litio.

Clase 4: Estructura molecular.

Teoría de orbitales moleculares. Moléculas diatómicas homonucleares.
Moléculas diatómicas heteronucleares.
Importancia en bioquímica: la reactividad bioquímica de O₂, N₂, y NO.

Orbitales moleculares de sistemas poliatómicos. Aproximación de Hückel.
Química computacional. Predicción de propiedades moleculares.

Simetría molecular. Clasificación de moléculas según su simetría.
Consecuencias inmediatas de la simetría. Integrales anuladas, solapamiento de orbitales y reglas de selección.

Clase 5: Espectroscopía molecular 1: espectros rotacionales y vibracionales

Generalidades. Técnicas experimentales. Intensidad y ancho de líneas espectrales.
Importancia en astrofísica: espectroscopía rotacional y vibracional del espacio interestelar.

Espectros puramente rotacionales. Momentos de inercia. Niveles de energía rotacional. Transiciones rotacionales. Espectro Raman rotacional.
Estadísticas nucleares y estados rotacionales.

Vibraciones de moléculas diatómicas. Reglas de selección. Anarmonicidad.
Espectros roto-vibracionales. Espectro Raman vibracional de moléculas diatómicas.
Vibraciones de moléculas poliatómicas. Modos normales. Simetría molecular y vibraciones. Absorción infrarroja. Espectro Raman vibracional de moléculas poliatómicas.
Importancia en climatología: calentamiento global.
Importancia en bioquímica: microscopía vibracional.

Clase 6: Espectroscopía molecular 2: transiciones electrónicas

Transiciones electrónicas. Espectro electrónico de moléculas diatómicas. Espectro electrónico de moléculas poliatómicas. Importancia en bioquímica: visión. El destino de estados electrónicos excitados: fluorescencia y fosforescencia, disociación y predisociación. Láseres. Principio de funcionamiento. Aplicaciones en química. Importancia en bioquímica y ciencia de materiales: microscopía de fluorescencia.

Clase 7: Espectroscopia molecular 3: resonancia magnética

El efecto de los campos magnéticos sobre los electrones y núcleos. Energía de electrones en campos magnéticos. Energías de núcleos en campos magnéticos. Espectroscopia de resonancia magnética.

Resonancia magnética nuclear. El espectrómetro de RMN. Corrimiento químico. Estructura fina. Procesos de conversión conformacional e intercambio. Técnicas pulsadas en RMN. El vector de magnetización. Relajación de espín. Desacoplamiento de espín. El efecto Overhauser nuclear. RMN bidimensional. RMN de estado sólido. Importancia en medicina: imágenes por RMN.

Resonancia electrónica paramagnética. El espectrómetro de REP. El valor g. Estructura hiperfina. Importancia en bioquímica: sondas de espín.

Clase 8: Interacciones moleculares

Usando termodinámica estadística. Energías medias. Capacidad calorífica. Ecuaciones de estado. Interacciones moleculares en líquidos. Entropía residual. Constantes de equilibrio.

Propiedades eléctricas de las moléculas. Dipolo eléctrico. Polarizabilidad. Permitividad Relativa. Interacción entre moléculas. Interacciones dipolares. Interacción repulsiva y total. Transferencia de energía de Foerster (FRET) y de Dexter. Impacto en medicina: reconocimiento molecular y diseño de drogas. Impacto en biología: microscopía FRET.

Gases and líquidos. Interacciones moleculares en gases. La interfaz vapor-líquido. Condensación.

Clase 9: Macromoléculas y agregados

Determinación de forma y tamaño. Masa molar media. Espectrometría de masas. Dispersión laser. Ultracentrifugación. Electroforésis. Viscosidad. Importancia en bioquímica: electroforesis de gel para genómica y proteínica.

Estructura y dinámica. Los distintos niveles de estructura. Enrollamiento aleatorio. Estructura y estabilidad de polímeros sintéticos. Estructura de proteínas. Estructura de ácidos nucleicos. Estabilidad de proteínas y ácidos nucleicos.

Importancia tecnológica: polímeros conductores.

Importancia en nanociencia: origamis de ADN.

Autoensamblado. Coloides. Micelas y membranas biológicas. Films superficiales.

Importancia en nanociencia: nano-fabricación con monocapas autoensambladas.

Clase 10: El estado sólido

Redes cristalinas. Identificación de planos cristalinos. Investigación de la estructura. Impacto en bioquímica: cristalográfia de rayos X de macromoléculas biológicas. Difracción de neutrones y electrones.

Estructura cristalina. Metales. Sólidos iónicos. Sólidos moleculares y redes covalentes.

Propiedades de los sólidos. Propiedades mecánicas. Propiedades eléctricas. Propiedades ópticas. Propiedades magnéticas. Superconductores.

Importancia en nanociencia: puntos cuánticos.

Importancia en nanociencia: nanocables y nanopartículas plasmónicas.

Clase 11: Moléculas en movimiento

Movimiento molecular en gases. Modelo cinético de gases. Colisiones con paredes y superficies. Tasa de efusión. Propiedades de transporte de un gas perfecto.

Importancia en astrofísica: el sol como una bola de gas perfecto.

Movimiento molecular en líquidos. Resultados experimentales. Movimiento Browniano. Conductividades de soluciones de electrolitos. Movilidad de iones. Conductividad e interacciones ion-ion.

Importancia en bioquímica: canales iónicos y bombas de iones.

Difusión. La perspectiva termodinámica. Ecuación de difusión.

Probabilidades de difusión. Perspectiva estadística.

Importancia en bioquímica: transporte de no-electrolitos a través de membranas biológicas.

Clase 12: Cinética de reacciones químicas

Cinética química empírica. Técnicas experimentales. Leyes integrales de cinéticas.

Reacciones cerca del equilibrio. Dependencia con la temperatura.
Reacciones elementales. Reacciones elementales consecutivas. Reacciones unimoleculares.
Importancia en bioquímica: cinética de la transición conformacional en polipéptidos.

Cinética de reacciones complejas. Reacciones en cadena. Explosiones.
Cinética de polimerización paso a paso, y en cadena. Catálisis homogénea.
Fotoquímica. Cinética de procesos fotoquímicos y fotofísicos. Procesos fotoquímicos complejos. Importancia en medicina: terapia fotodinámica.
Importancia ambiental: química del ozono estratosférico.
Importancia en bioquímica: recolección de luz en la fotosíntesis.

Clase 13: Dinámica de reacciones moleculares

Encuentros reactivos. Teoría de colisiones. Reacciones controladas por difusión. La ecuación de balance material. Teoría de estado de transición. Ecuación de Eyring. Aspectos termodinámicos.

Dinámica de colisiones moleculares. Colisiones reactivas. Superficies de energía potencial. Experimentos y cálculos. Investigación de dinámica de reacciones mediante técnicas ultrarrápidas.

Transferencia electrónica en sistemas homogéneos. Cinética de procesos de transferencia electrónica. Teoría de transferencia electrónica. Resultados experimentales.

Importancia en bioquímica: transferencia electrónica entre proteínas.

Clase 14: Procesos sobre superficies sólidas

Crecimiento y estructura de superficies sólidas. Composición superficial. Adsorción. Fisisorción y quimisorción. Isotermas de adsorción. Cinética de procesos superficiales. Importancia en bioquímica: análisis de biosensores.

Catálisis heterogénea. Mecanismo. Actividad catalítica de superficies. Impacto tecnológico: catalisis en la industria química.

Procesos en electrodos. La interfaz electrodo-solución. La cinética de transferencia de carga. Voltametría. Electrólisis. Celdas galvánicas. Corrosión.

Impacto tecnológico: protección de materiales contra la corrosión.
Impacto tecnológico: celdas de combustible.

El programa está planeado para una materia cuatrimestral con 5 horas/semana de clase teóricas y 5 horas/semana de prácticas.

Evaluación

Aprobación de TP y examen final.

Bibliografía

Peter Atkins, Julio de Paula, [Physical Chemistry \[8th ed.\]](#) W. H. Freeman
2006

Peter Atkins, Julio de Paula, Physical Chemistry for the Life Sciences [1st ed.]
W. H. Freeman, 2005

S. F. Sun , Physical Chemistry of Macromolecules [2nd ed.]
Wiley-Interscience , 2004